

Universidade Federal de Juiz de Fora

Pós-Graduação em Matemática

Mestrado em Matemática

*Angel Enrique Ramirez Gutierrez*

*Aplicação do método de complementaridade  
não linear para o estudo de combustão de  
oxigênio in situ*

Juiz de Fora

2013

*Angel Enrique Ramirez Gutierrez*

*Aplicação do método de complementaridade  
não linear para o estudo de combustão de  
oxigênio in situ*

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Matemática da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito para obtenção do grau de Mestre, na área de matemática aplicada.

Orientador : Dr. Grigori Chapiro.

Co-orientador : Dr. Sandro Rodrigues Mazorche.

Juiz de Fora

2013

Ramirez Gutierrez, Angel Enrique.

Aplicação do método de complementaridade não linear  
para o estudo de combustão de oxigênio in situ / Angel Ramirez.  
2013. 87f. : il.

Dissertação (Mestrado em Matemática) – Universidade Federal de  
Juiz de Fora, Juiz de Fora, 2013.

1. Combustão. 2. Difusão. 3. Complementaridade.  
4. Diferenças Finitas. 5. Leis de Conservação. I. Título.

*Angel Enrique Ramirez Gutierrez*

*Aplicação do método de complementaridade  
não linear para o estudo de combustão de  
oxigênio in situ*

Dissertação aprovada pela Comissão Examinadora abaixo elencada como requisito para a obtenção do título de Mestre em Matemática pelo Mestrado Acadêmico em Matemática do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Juiz de Fora.

Banca examinadora:

---

Prof. Dr. Grigori Chapiro  
(Orientador)  
Mestrado Acadêmico em Matemática  
Instituto de Ciências Exatas - UFJF

---

Prof. Dr. Sandro Rodrigues Mazorche  
(Co-orientador)  
Mestrado Acadêmico em Matemática  
Instituto de Ciências Exatas - UFJF

---

Prof. Dr. Rodrigo Weber dos Santos  
Universidade Federal de Juiz de Fora

---

Prof. Dr. Frederico da Cunha Furtado  
University of Wyoming, EUA.

Juiz de Fora, 18 de Julio de 2013.

*A meus pais, Graciela e Angel, que sempre me ajudaram com seu apoio e conselhos de maneira incondicional. A minha irmãzinha que cuida de mim lá do céu.*

# *AGRADECIMENTOS*

Ao finalizar este trabalho de dissertação indicando o final do percurso do mestrado, meta conseguida com muito esforço e trabalho, para o qual intervieram pessoas que colaboraram para cumprir este objetivo.

Quero agradecer a meu orientador, Dr. Grigori Chapiro pela sua paciência, tempo, apoio e dedicação para me orientar. Agradeço a ele por me aceitar para trabalhar na dissertação de mestrado sob sua orientação. Sua confiança, amizade e capacidade para guiar minhas idéias foram de muito valor, não só no desenvolvimento da tese, mas também na minha formação como pesquisador. Agradeço as ideias, rigorosidade e críticas com a finalidade de realizar um bom trabalho. Muito obrigado Professor.

Quero expressar também meu mais sincero agradecimento ao Dr. Sandro Mazorche pelo seu apoio e participação na conclusão da dissertação, sua disponibilidade e paciência.

Agradeço ao Departamento de Matemática da Universidade Federal de Juiz de Fora, aos professores, pessoal administrativo e funcionários que contribuíram na minha formação.

Agradeço o apoio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES, que permitiu concluir os estudos de mestrado satisfatoriamente.

A meus pais, minha mãe Graciela e meu pai Angel, que sempre acreditam e apoiam os meus objetivos.

A todos meus amigos, que compartilharam comigo tempo de estudo, conversas e brincadeiras, tornando estes anos de estudos mais leves.

# *RESUMO*

Alguns problemas parabólicos podem ser reescritos na forma de problema de complementaridade e aparecem em muitas aplicações como em fluxos de líquidos no interior num domínio, difusão, fluxo de calor envolvendo mudança de fase e reações químicas. Estes tipos de problemas apresentam muitas dificuldades analíticas e numéricas, normalmente devido à evolução no tempo ou fronteira móvel. Como a solução analítica é muito difícil de obter, é importante o estudo de métodos numéricos que permitam a busca de uma solução aproximada da solução exata para tais tipos de problemas. Estuda-se leis de conservação e os tipos de soluções associadas ao Problema de Riemann, essencialmente leis de balanço que expressam o fato de que alguma substância é conservada. O estudo desta teoria é importante porque frequentemente as leis de conservação aparecem quando nos problemas parabólicos são desprezados os termos difusivos de segunda ordem. Apresenta-se também um método numérico que é uma variação do método de Newton para resolver sistemas não lineares. O método é baseado num esquema de diferenças finitas implícito e um algoritmo de complementaridade não linear, FDA–NCP. O método dado tem a vantagem de fornecer uma convergência global em relação ao método de diferenças finitas com o método de Newton que só tem convergência local. A teoria é aplicada ao modelo de difusão de oxigênio num tecido e ao modelo de combustão de oxigênio in situ, os dois modelos são problemas parabólicos linear e não linear respectivamente e que podem ser reescritos na forma de problema de complementaridade. O primeiro modelo que pode ser aplicado no tratamento de células cancerígenas conduz a um problema de fronteira livre enquanto no segundo modelo, consideramos um processo unidimensional de injeção de ar dentro de um meio poroso que contém inicialmente combustível sólido e onde ocorre combustão gas–sólido, assim o modelo envolve a lei de balanço do calor, lei molar do combustível e a lei de gases ideais. Além disso, estuda-se a onda térmica e a onda de combustível associadas.

Palavras–chave: Combustão. Difusão. Complementaridade. Diferenças Finitas. Leis de Conservação.

# *ABSTRACT*

Some parabolic problems can be rewritten in complementarity form and appear in many applications such as liquid flows within a domain, diffusion, heat flow involving phase change and chemical reactions. These types of problems have many analytical and numerical difficulties, usually due to the evolution in time or moving boundary. Since the analytical solution is very difficult to obtain, so it is important to study numerical methods that allow the search for an approximate solution of the exact solution for these types of problems. We study the conservation laws and the types of solutions associated with the Riemann Problem, these types of laws are essentially balance laws that express the fact that some substance is balanced. The study of this theory is important because the conservation laws often appear when the parabolic problems are neglected the diffusive terms of second order. It also presents a numerical method which is a variation of the Newton's method for solving nonlinear systems, the method is based on an implicit finite difference scheme and an algorithm complementary non-linear FDA-NCP. The given method has the advantage of providing a global convergence with respect to the finite difference method with Newton's method which has only local convergence. The theory is applied to the model diffusion in tissue of oxygen and oxygen combustion model in situ, this two models are linear and nonlinear parabolic problems respectively and which can be rewritten in the form of complementarity problem. The first model that can be applied in the treatment of cancer cells leads to a free boundary problem, while the second model, consider a one-dimensional process of air injection inside a porous medium initially containing solid fuel and where combustion occurs gas - solid thus the model involves the heat balance law, law and the fuel molar ideal gas law, in addition, studies the thermal wave and the wave associated fuel.

Key-words: Combustion. Diffusion. Complementarity. Finite Difference. Conservation Laws.

# *LISTA DE FIGURAS*

1.1	A curva $x_s(t)$ que divide o plano em duas regiões . . . . .	18
1.2	Locus de Hugoniot para o estado $U^*$ do sistema (1.8). . . . .	21
2.1	Representação da malha do esquema de diferenças finitas. . . . .	33
2.2	Discretização para a análise de erro. . . . .	40
3.1	Representação das direções . . . . .	48
4.1	Difusão do oxigênio num tecido. . . . .	52
4.2	Discretização Espacial pelo método de Ghost Point . . . . .	54
4.3	Resultados Difusão de Oxigênio com $M = 50$ . . . . .	59
4.4	Resultados Difusão de Oxigênio com $M = 200$ . . . . .	60
4.5	Análise de Erro na Difusão de Oxigênio num Tecido . . . . .	61
5.1	Combustão de oxigênio in-situ . . . . .	63
5.2	Resultados Combustão de Oxigênio In Situ com $M = 50$ . . . . .	73
5.3	Resultados Combustão de Oxigênio in situ com $M = 200$ . . . . .	74
5.4	Análise de Erro na Combustão de Oxigênio in situ e FDA–NCP . . . . .	76
5.5	Análise de Erro na Combustão de Oxigênio in situ e Crank–Nicolson–Newton . . . . .	77
5.6	Onda Térmica, Onda de Combustível e Onda de Combustão. . . . .	80

# *LISTA DE TABELAS*

2.1	Erro Relativo para o método de Crank–Nicolson . . . . .	41
4.1	Análise de Erro do método FDA–NCP para a Difusão de Oxigênio. . . . .	61
4.2	Análise de Erro do método Crank–Nicolson para a Difusão de Oxigênio. . . . .	62
5.1	Parâmetros dimensionais para combustão in situ e seus valores típicos . . . . .	64
5.2	Comparação do tempo de processo computacional com $M = 50$ para os métodos FDA–NCP e de Crank–Nicolson com Newton. . . . .	75
5.3	Comparação do tempo de processo computacional com $M = 200$ para os métodos FDA–NCP e Crank–Nicolson com Newton. . . . .	75
5.4	Análise de Erro para $\theta$ com FDA–NCP na Combustão de Oxigênio . . . . .	77
5.5	Análise de Erro para $\eta$ com FDA–NCP na Combustão de Oxigênio. . . . .	78
5.6	Análise de Erro para $\theta$ com Crank–Nicolson-Newton na Combustão de Oxigênio. . . . .	78
5.7	Análise de Erro para $\eta$ com Crank–Nicolson-Newton na Combustão de Oxigênio. . . . .	79

# *SUMÁRIO*

<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>12</b>
<b>1 LEIS DE CONSERVAÇÃO E SISTEMAS HIPERBÓLICOS</b>	<b>14</b>
1.1 SISTEMAS HIPERBÓLICOS . . . . .	15
1.2 SOLUÇÃO FORTE E SOLUÇÃO FRACA . . . . .	16
1.3 CONDIÇÕES DE ENTROPIA . . . . .	22
1.3.1 Critério de Lax . . . . .	22
1.3.2 Critério de Viscosidade . . . . .	23
1.4 SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE RIEMANN . . . . .	26
1.4.1 Campos Característicos . . . . .	27
1.4.2 Ondas de Choque . . . . .	28
1.4.3 Ondas de Rarefação . . . . .	29
1.4.4 Descontinuidade de Contato . . . . .	31
<b>2 ESQUEMA DE DIFERENÇAS FINITAS</b>	<b>33</b>
2.1 CONSISTÊNCIA, ESTABILIDADE E CONVERGÊNCIA . . . . .	35
2.2 ANÁLISE DE ERRO . . . . .	38
2.3 MÉTODO DE NEWTON . . . . .	41
<b>3 PROBLEMA DE COMPLEMENTARIDADE NÃO LINEAR</b>	<b>44</b>
3.1 CONCEITOS BÁSICOS . . . . .	44
3.2 ALGORITMO DE PONTO INTERIOR VIÁVEL PARA NCP . . . . .	45
3.3 DESCRIÇÃO DO ALGORITMO FDA–NCP . . . . .	49

3.4	CONVERGÊNCIA GLOBAL DO FDA–NCP . . . . .	50
<b>4</b>	<b>DIFUSÃO DO OXIGÊNIO NUM TECIDO</b>	<b>52</b>
4.1	MODELAGEM DO PROBLEMA FÍSICO . . . . .	52
4.2	DESCRIÇÃO DOS ESQUEMAS NUMÉRICOS . . . . .	54
4.2.1	Aplicando FDA-NCP . . . . .	55
4.2.2	Aplicando Crank-Nicolson . . . . .	57
4.2.3	Comparação dos Métodos FDA–NCP com Crank–Nicolson . . . . .	58
4.2.4	Análise de Erro . . . . .	61
4.3	CONCLUSÕES PARCIAIS . . . . .	62
<b>5</b>	<b>MODELO SIMPLES DE COMBUSTÃO DE OXIGÊNIO IN-SITU</b>	<b>63</b>
5.1	MODELAGEM DO PROBLEMA FÍSICO . . . . .	63
5.1.1	Equações Adimensionais . . . . .	65
5.2	DESCRIÇÃO DOS ESQUEMAS NUMÉRICOS . . . . .	66
5.2.1	Método FDA-NCP . . . . .	67
5.2.2	Método de Crank–Nicolson–Newton . . . . .	70
5.2.3	Comparação dos Métodos FDA-NCP com Crank Nicolson-Newton . . . . .	72
5.2.4	Análise de Erro . . . . .	76
5.3	APLICANDO LEIS DE CONSERVAÇÃO . . . . .	79
5.3.1	Onda de Combustível . . . . .	80
5.3.2	Onda Térmica . . . . .	81
5.3.3	Onda de Combustão . . . . .	81
5.4	CONCLUSÕES PARCIAIS . . . . .	81
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>83</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>85</b>

# *INTRODUÇÃO*

O estudo das equações diferenciais parciais de tipo parabólico é muito importante devido a sua ampla aplicação nas áreas de Economia, Engenharia e Física [15]. Com o objetivo de encontrar uma aproximação à solução exata desenvolveram-se métodos numéricos que nos permitem cumprir o objetivo. Estas técnicas serão aplicadas a dois modelos, um apresentado por uma equação diferencial parcial parabólica linear e outro por uma não linear: difusão de oxigênio num tecido e combustão de oxigênio in situ, respectivamente.

A difusão de oxigênio é um problema estudado por diversos autores, entre eles temos [13], [1], [5] [4]. Uma descrição breve deste modelo consiste na injeção e difusão de oxigênio dentro de um meio. Parte dele é absorvido pelo meio e a concentração de oxigênio na superfície do meio é mantida constante. Esta primeira fase do problema continua até atingir um estado estacionário ou de equilíbrio, isto é, já não há consumo de oxigênio. Logo ocorre uma segunda fase quando a superfície é selada de modo que o oxigênio já não entra nem sai e o meio continua absorvendo o oxigênio disponível e, como consequência, o limite máximo de absorção de oxigênio definido pelo estado estacionário começa a recuar até a superfície selada. Portanto, o maior desafio é procurar o caminho do movimento da fronteira móvel durante este estágio do processo e a determinação da distribuição do oxigênio no meio em qualquer instante do tempo. Este tipo de problema é conhecido como um Problema de Fronteira Livre.

O modelo de combustão de oxigênio in situ é um caso particular do modelo tratado em [8], [9], [22]. Neste caso, o modelo considera a injeção de ar num meio poroso que contém combustível sólido e consiste de um sistema de duas equações diferenciais de tipo parabólico não lineares. Para este problema estudamos as soluções do Problema de Riemann obtendo a onda de combustível e a onda térmica associadas ao combustível e à temperatura, respectivamente.

As contribuições do trabalho são: estudo do modelo de combustão de oxigênio in situ via leis de conservação e também as simulações para os dois modelos propostos aplicando o método de Crank–Nicolson com Newton e o algoritmo FDA–NCP [25]. A implementação será feita em Matlab 2010, o qual é um programa criado nos anos 1970 e destinado para

fazer cálculos numéricos, científicos e é amplamente utilizado no campo da engenharia.

Este trabalho está organizado como segue. No Capítulo 1 faremos uma introdução às leis de conservação. No Capítulo 2 descreveremos o método de diferenças finitas usado nas simulações. No Capítulo 3 apresentamos o algoritmo de direções viáveis para problemas de complementaridade não linear (FDA–NCP), que será usado nos capítulos seguintes. No Capítulo 4 estudaremos o Problema de Difusão de Oxigênio num tecido, mostraremos alguns resultados numéricos e faremos a análise de erro. No Capítulo 5 trataremos do problema de Combustão de Oxigênio in-situ, também mostraremos os resultados numéricos e a análise de erro correspondente. Finalmente apresentaremos algumas conclusões e a bibliografia.

# 1 LEIS DE CONSERVAÇÃO E SISTEMAS HIPERBÓLICOS

Os sistemas hiperbólicos ocupam um papel importante na engenharia, área na qual os modelos matemáticos são frequentemente baseados em princípios físicos chamados *Leis de Conservação*, os quais tem a forma seguinte:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial f(U)}{\partial x} = 0, \quad U : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^m, \quad (1.1)$$

onde  $U(x, t)$  representa as variáveis de estado (tais como densidade, temperatura, etc) no ponto  $x$ , instante  $t$  e  $f(U)$  é o fluxo dessas variáveis, [20].

Em [3], a equação (1.1) é descrita brevemente ao supor um volume de controle  $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ , em que uma quantidade física (densidade ou concentração)  $U = U(x, t)$  de alguma substância por unidade de volume depende de  $m$  variáveis espaciais  $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)$  e do tempo  $t > 0$ . Temos:

Quantidade total da substância dentro do volume de controle	$= \int_{\Omega} U(x, t) d\Omega.$	(1.2)
--	------------------------------------	-------

A substância pode ser criada ou destruída dentro do volume de controle por uma fonte externa ou interna. A taxa de criação ou destruição da substância, que chamaremos de **termo fonte** e denotaremos por  $\phi(x, t, U)$ , tem sinal positivo se a substância é criada dentro do volume de controle e negativa se a substância for destruída dentro do volume de controle.

Taxa de criação da substância dentro do volume de controle	$= \int_{\Omega} \phi(x, t, U) d\Omega.$	(1.3)
---	--	-------

Em  $m$  dimensões, o fluxo pode ser em qualquer direção, logo ele é uma grandeza vetorial que denotaremos por  $f(x, t)$ . Se  $\eta(x)$  denota o vetor unitário normal apontando para fora da região  $\Omega$ , a taxa de transferência líquida da substância para fora do volume

de controle através de sua fronteira  $\partial\Omega$  é dada por:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{Taxa de transferência líquida da substância} \\ \text{para fora do volume de controle} \end{array}} = \int_{\partial\Omega} f(x, t) \cdot \eta \, dS. \quad (1.4)$$

Portanto, a lei de conservação fica, [18]:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} U(x, t) \, d\Omega = - \int_{\partial\Omega} f(x, t) \cdot \eta \, dS + \int_{\Omega} \phi(x, y, U) \, d\Omega. \quad (1.5)$$

Se  $U$ ,  $f$  e  $\phi$  forem todas de classe  $C^1$  (assim como a região  $\Omega$ ), podemos derivar sob o sinal de integração e usar o Teorema da Divergência e obter:

$$U_t + \operatorname{div}(f) = \phi(x, t, U). \quad (1.6)$$

Então, a equação (1.6) relaciona a função  $U$ , a função fluxo  $f$  e o término fonte  $\phi$  a qual é denominada **Lei de balanço**. Por outro lado, para a modelagem ter sentido precisamos de um ponto inicial  $U(x, 0) = U_0(x)$ .

Nosso estudo estará restringido ao caso de  $(x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$  e nesse caso a equação (1.6) se escreve como:

$$U_t(x, t) + [f(U)]_x = \phi(x, t, U). \quad (1.7)$$

Na seção seguinte estudaremos com maior detalhe a equação (1.7) com termo fonte  $\phi \equiv 0$ .

## 1.1 SISTEMAS HIPERBÓLICOS

Nesta seção estudamos a equação (1.7) a qual representa um sistema de leis de conservação, onde  $U : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^m$  e com função de fluxo  $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ . No caso linear temos que  $f(U) = AU$  então  $f'(U) = A$  com  $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$  uma matriz constante. O sistema (1.7) é dito **Hiperbólico** se a matriz jacobiana  $f'(U) \in \mathbb{R}^{m \times m}$  é diagonalizável com autovalores reais e é dito **estritamente Hiperbólico** se todos os autovalores  $\lambda_1(U), \lambda_2(U), \dots, \lambda_m(U)$  são distintos e além disso:

$$\lambda_1(U) < \lambda_2(U) < \dots < \lambda_m(U),$$

e sendo  $r_1(U), r_2(U), \dots, r_m(U)$  os respectivos autovetores.

Como exemplo consideraremos o seguinte esquema que será abordado em mais deta-

lhes no Capítulo 5:

$$\begin{aligned} \theta_t + \left( \frac{\theta}{\theta + \theta_0} \right)_x &= 0, \\ \eta_t &= 0, \end{aligned} \tag{1.8}$$

onde  $\theta_0$  é uma constante real positiva.

Sendo  $U = \begin{pmatrix} \theta \\ \eta \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$  temos que:

$$f(U) = \begin{pmatrix} \frac{\theta}{\theta + \theta_0} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Rightarrow \quad f'(U) = \begin{pmatrix} \frac{\theta_0}{(\theta + \theta_0)^2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

tem autovalores  $\lambda_1 = \lambda_1(U) = 0$ ,  $\lambda_2 = \lambda_2(U) = \frac{\theta_0}{(\theta + \theta_0)^2}$  e se cumpre  $\lambda_1 < \lambda_2$ . Portanto, o sistema (1.8) é um sistema **estritamente hiperbólico**. Além disso, os autovetores associados são:

$$r_1 = r_1(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad r_2 = r_2(U) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

para  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  respectivamente.

## 1.2 SOLUÇÃO FORTE E SOLUÇÃO FRACA

Estudaremos leis de conservação da forma seguinte:

$$\begin{aligned} U_t + [f(U)]_x &= 0, \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \\ U(x, 0) = U_0(x) &= \begin{cases} U_l & \text{se } x \leq 0, \\ U_r & \text{se } x > 0, \end{cases} \end{aligned} \tag{1.9}$$

onde  $U : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^m$ ,  $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ ,  $U_l, U_r \in \mathbb{R}^m$ . O problema (1.9) é chamado **Problema de Riemann**. Note que a condição inicial pode ter uma descontinuidade em  $x = 0$ . O caso trivial acontece quando  $U_l = U_r$ . Tem-se em [20], [33] que mesmo no caso escalar ( $m = 1$ ) e a condição inicial  $U_0(x)$  seja bastante regular, não poderemos assumir que a solução  $U(x, t)$  seja regular para todo  $t > 0$ . Resolve-se isto admitindo soluções descontínuas (choques) [14], o que motiva a generalizar a definição de solução, pois a noção de uma solução da equação diferencial parcial (1.9), conhecida como **solução forte** ou também *solução clássica*, é uma função de classe  $C^1$  e satisfaz (1.9). Logo, como uma função descontínua não pode ser solução no sentido clássico, no que segue definimos um novo tipo de solução mas precisamos da seguinte definição:

**Definição 1.1.** Uma função  $\phi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$  tem suporte compacto se  $\phi \equiv 0$  fora de

um conjunto compacto de  $\mathbb{R}$ . Uma função teste é uma função  $\phi : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$  de suporte compacto e  $\phi \in C^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))$ . O conjunto das funções testes será denotado por  $\mathcal{D}(\mathbb{R} \times [0, \infty))$ .

Multiplicando  $U_t + f(U)_x = 0$  por uma função teste  $\phi(x, t) \in \mathcal{D}(\mathbb{R} \times [0, \infty))$ , integrando o resultado na região  $(-\infty, \infty) \times (0, \infty)$ , obtemos:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [U_t + f(U)_x] \phi \, dx \, dt = 0,$$

passando a derivada para a função suave:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [U \phi_t + f(U) \phi_x] \, dx \, dt = - \int_{-\infty}^\infty U(x, 0) \phi(x, 0) \, dx. \quad (1.10)$$

Isso motiva a seguinte definição.

**Definição 1.2** (Solução Fraca). Dizemos que  $U \in L^\infty(\mathbb{R} \times (0, \infty))$  é uma solução fraca da lei de conservação definida em (1.9), se ela satisfaz a equação (1.10) para toda  $\phi \in \mathcal{D}(\mathbb{R} \times [0, \infty))$ .

**Teorema 1.3.** Se  $U$  é solução clássica de (1.9), então  $U$  é solução fraca de (1.9).

**Demonstração:** Se  $U$  é solução clássica de (1.9), então  $U$  é continuamente diferenciável e

$$\begin{aligned} U_t + [f(U)]_x &= 0, \quad x \in \mathbb{R}, t \in [0, \infty), \\ U(x, 0) &= U_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \end{aligned}$$

além disso, para qualquer função suave  $\phi \in \mathcal{D}(\mathbb{R} \times [0, \infty))$  tem-se:

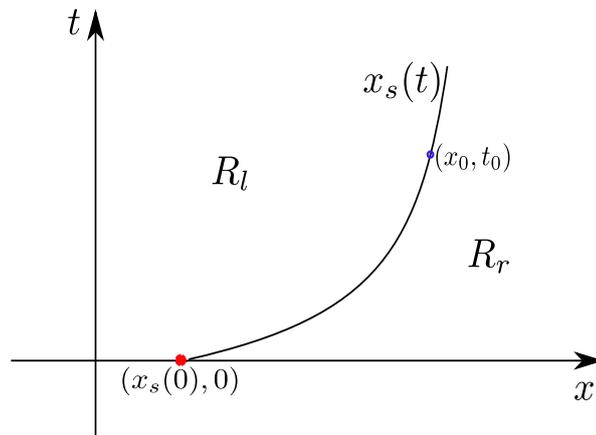
$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [U_t + f(U)_x] \phi \, dx \, dt = 0,$$

integrando por partes e usando o fato que  $\phi$  é nulo no infinito, temos que:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [U \phi_t + f(U) \phi_x] \, dx \, dt = - \int_{-\infty}^\infty U(x, 0) \phi(x, 0) \, dx.$$

Assim, a solução clássica  $u$  é também uma solução fraca. ■

Como as soluções fracas geralmente não são contínuas, então para descrever essas soluções, seja  $x_s(t)$  uma curva no plano  $xt$  que divide o semiplano  $t > 0$  em duas partes:  $R_r$  a direita da curva e  $R_l$  a esquerda da curva, como mostra a Figura 1.1 e definimos uma solução contínua por partes.



**Figura 1.1:** A curva  $x_s(t)$  que divide o plano em duas regiões

**Definição 1.4.** Uma função  $U(x, t)$  é denominada solução contínua por partes do problema (1.9) com descontinuidade do tipo salto ao longo da curva  $x_s(t)$ , se  $U(x, t)$  tem as seguintes propriedades:

1.  $U(x, t)$  tem derivadas primeiras contínuas em  $R_r$  e  $R_l$  e é solução do problema

$$\begin{aligned} U_t + [f(U)]_x &= 0, & (x, t) \in R_l, & \quad t > 0, \\ U(x, 0) &= U_0(x), & x < x_s(0), & \end{aligned}$$

em  $R_l$  e do problema

$$\begin{aligned} U_t + [f(U)]_x &= 0, & (x, t) \in R_r, & \quad t > 0, \\ U(x, 0) &= U_0(x), & x > x_s(0), & \end{aligned}$$

em  $R_r$ .

2. Em cada ponto  $(x_0, t_0)$  de  $x_s(t)$ , os limites de  $U(x, t)$  quando  $(x, t) \rightarrow (x_0, t_0)$ ,  $(x, t) \in R_l$  e  $(x, t) \rightarrow (x_0, t_0)$ ,  $(x, t) \in R_r$  existem mas não são necessariamente iguais.

O seguinte teorema é de muita importância para quando consideramos uma solução fraca do problema de Riemann.

**Teorema 1.5.** Se  $U$  é uma solução fraca de (1.9) tal que  $U$  é descontínua ao longo da curva  $x = \xi(t)$  mas  $U$  é suave nos dois lados da curva  $x = \xi(t)$ , então  $U$  deve satisfazer a seguinte condição:

$$f(U_l) - f(U_r) = \xi'(t)(U_l - U_r), \quad (1.11)$$

ao longo da curva de descontinuidade, onde  $U_l$  é o limite de  $U(x, t)$  em  $R_l$  e  $U_r$  é o limite de  $U(x, t)$  em  $R_r$ . Chama-se  $s = \xi'(t)$  a **velocidade de propagação da descontinuidade**.

**Demonstração:** Se  $U$  é solução fraca de (1.9), então:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [U\phi_t + f(U)\phi_x] dxdt + \int_{-\infty}^\infty U_0(x)\phi(x,0) dx = 0,$$

para toda função teste  $\phi \in \mathcal{D}(\mathbb{R} \times [0, \infty))$ . Seja  $\phi$  uma função teste tal que  $\phi(x,0) = 0$  e partimos a primeira integral nas regiões  $R^-$  e  $R^+$ , onde:

$$\begin{aligned} R_l &\equiv \{(x,t) : 0 < t < \infty, -\infty < x < \xi(t)\}, \\ R_r &\equiv \{(x,t) : 0 < t < \infty, \xi(t) < x < +\infty\}. \end{aligned}$$

Então:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [U\phi_t + f(U)\phi_x] dxdt + \int_{-\infty}^\infty U_0(x)\phi(x,0) dx = \\ &= \int \int_{R_l} [U\phi_t + f(U)\phi_x] dxdt + \int \int_{R_r} [U\phi_t + f(U)\phi_x] dxdt, \end{aligned} \quad (1.12)$$

empregando o Teorema da Divergência e o fato de  $\phi$  ter suporte compacto com  $\phi(x,0) = 0$ , tem-se:

$$\int \int_{R_l} [U\phi_t + f(U)\phi_x] dxdt = - \int \int_{R_l} [U_t + f(U)_x] \phi dxdt + \int_{x=\xi(t)} [U_l\nu_2 + f(U_l)\nu_1] \phi ds, \quad (1.13)$$

onde  $\nu = (\nu_1, \nu_2)$  é a derivada normal unitária a  $R_l$ . Similarmente temos que:

$$\int \int_{R_r} [U\phi_t + f(U)\phi_x] dxdt = - \int \int_{R_r} [U_t + f(U)_x] \phi dxdt + \int_{x=\xi(t)} [U_r\nu_2 + f(U_r)\nu_1] \phi ds. \quad (1.14)$$

Pela hipótese de  $U$  ser uma solução fraca de  $U_t + [f(U)]_x = 0$  e  $U$  é suave a ambos lados de  $x = \xi(t)$ . Além disso,  $U$  é uma solução clássica a cada lado da curva de descontinuidade  $x = \xi(t)$ . Em consequência, temos que:

$$\int \int_{R_r} [U_t + f(U)_x] \phi dxdt = 0 = \int \int_{R_l} [U_t + f(U)_x] \phi dxdt.$$

Dos fatos (1.12), (1.13) e (1.14) obtemos:

$$\int_{x=\xi(t)} [U_l\phi\nu_2 + f(U_l)\phi\nu_1] ds - \int_{x=\xi(t)} [U_r\phi\nu_2 + f(U_r)\phi\nu_1] ds = 0,$$

como a relação anterior se cumpre para toda função teste  $\phi$ , então:

$$U_l\nu_2 + f(U_l)\nu_1 = U_r\nu_2 + f(U_r)\nu_1,$$

o qual implica:

$$\frac{f(U_l) - f(U_r)}{U_l - U_r} = -\frac{\nu_2}{\nu_1}.$$

Sendo  $\Gamma(t) = (\xi(t), t)$  uma parametrização da curva  $x = \xi(t)$  a qual tem normal  $(\nu_1, \nu_2)$ , então:

$$0 = \Gamma'(t) \cdot (\nu_1, \nu_2) = (\xi'(t), 1) \cdot (\nu_1, \nu_2) \implies \xi'(t) = -\frac{\nu_2}{\nu_1},$$

portanto:

$$\xi'(t) = -\frac{\nu_2}{\nu_1} = \frac{f(U_l) - f(U_r)}{U_l - U_r}.$$

■

O Teorema 1.5 sugere que para estender a solução obtida pelo método das características numa região  $\Omega$ , a curva  $x = \xi(t)$  que separa as descontinuidades com velocidade  $s = \xi'(t)$ , chamada **choque** ou **descontinuidade**, na solução do problema de Riemann (1.9), a curva  $x = \xi(t)$  é caracterizada pelos valores  $U_l$  e  $U_r$  como sendo os estados a direita e esquerda respectivamente e com velocidade de propagação  $s$  [14].

Denotamos esta caracterização do choque por  $(U_l, U_r, s)$ . Dentre as várias curvas com esta propriedade, escolhemos a que satisfaz a condição (1.11) a qual motiva a seguinte definição [28].

**Definição 1.6.** Um choque  $(U_l, U_r, s)$  cumpre a condição de Rankine-Hugoniot se e somente se:

$$f(U_r) - f(U_l) = s(U_r - U_l). \quad (1.15)$$

Para um estado fixo  $U^*$  temos a seguinte definição, [29].

**Definição 1.7.** O lugar geométrico de Hugoniot para um estado fixo  $U^*$  ou simplesmente Locus de Hugoniot, é o seguinte conjunto:

$$H(U^*) = \{U \in \mathbb{R}^m / \exists s \in \mathbb{R} : f(U) - f(U^*) = s(U - U^*)\}. \quad (1.16)$$

Retornando para o exemplo (1.8) que será tratado no Capítulo 5, o locus de Hugoniot para um estado fixo  $U^* = \begin{pmatrix} \theta^* \\ \eta^* \end{pmatrix}$  é:

$$\begin{pmatrix} \frac{\theta}{\theta + \theta_0} \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\theta^*}{\theta^* + \theta_0} \\ 0 \end{pmatrix} = s \left[ \begin{pmatrix} \theta \\ \eta \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \theta^* \\ \eta^* \end{pmatrix} \right],$$

então:

$$\frac{\theta}{\theta + \theta_0} - \frac{\theta^*}{\theta^* + \theta_0} = s(\theta - \theta^*), \quad (1.17a)$$

$$0 = s(\eta - \eta^*). \quad (1.17b)$$

De (1.17b) temos que  $s = 0$  ou  $\eta = \eta^*$ . Logo:

- a) Se  $s = 0$  então de (1.17a) obtemos que  $\theta = \theta^*$  se e somente se  $\theta_0 \neq 0$ . Logo, o locus de Hugoniot é:

$$H_1(U^*) = \left\{ U = \begin{pmatrix} \theta^* \\ \eta \end{pmatrix} / \text{existe } s \in \mathbb{R} : f(U) - f(U^*) = s(U - U^*) \right\}, \quad (1.18)$$

e velocidade de choque  $s_1 = s = 0$ .

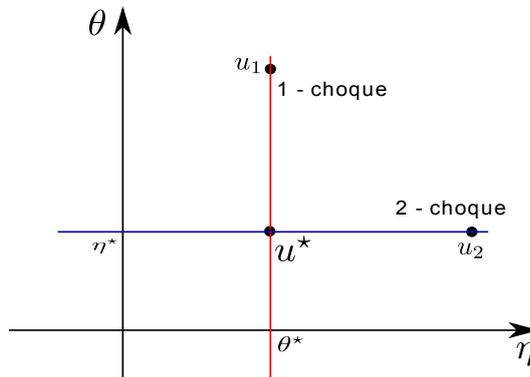
- b) Se  $\eta = \eta^*$  então de (1.17a) tem-se  $s = \frac{\theta_0}{(\theta + \theta^*)(\theta + \theta_0)}$  e o locus de Hugoniot é.

$$H_2(U^*) = \left\{ U = \begin{pmatrix} \theta \\ \eta^* \end{pmatrix} / \text{existe } s \in \mathbb{R} : f(U) - f(U^*) = s(U - U^*) \right\}, \quad (1.19)$$

e velocidade de choque  $s_2 = s = \frac{\theta_0}{(\theta + \theta^*)(\theta + \theta_0)}$ .

**Definição 1.8.** Dizemos que um estado  $U$  está ligado por um  $i$ -choque ao estado fixo  $U^*$  se e somente se  $U$  pertence ao locus de Hugoniot de  $U^*$  seguindo a  $i$ -ésima curva.

Para o sistema (1.8) temos que o estado  $U_1 = \begin{pmatrix} \theta^* \\ \eta \end{pmatrix}$  está ligado por 1-choque ao estado fixo  $U^*$  enquanto o estado  $U_2 = \begin{pmatrix} \theta \\ \eta^* \end{pmatrix}$  está ligado por um 2-choque ao estado fixo  $U^*$ , os quais são mostrados na Figura 1.2.



**Figura 1.2:** Locus de Hugoniot para o estado  $U^*$  do sistema (1.8).

## 1.3 CONDIÇÕES DE ENTROPIA

Uma solução fraca do Problema de Riemann (1.9) depende do choque  $(U_l, U_r, s)$ , mas, quais destas soluções são choques admissíveis?. Para garantir unicidade de solução fraca é comum empregar uma **condição de entropia**, isto é, uma condição adicional que ajuda a escolher a solução de forma única e de que seja fisicamente admissível. Neste trabalho faremos uma breve discussão do critério de entropia de Lax [20], e do critério de viscosidade [26]. Com estas condições poderemos dizer quando um choque é admissível [28].

### 1.3.1 Critério de Lax

Em [20] temos o seguinte critério de entropia devido a Lax.

**Definição 1.9.** Um choque  $(U_l, U_r, s)$  é dito que satisfaz a condição de entropia de Lax se:

$$\lambda_i(U_l) > s > \lambda_i(U_r), \quad \text{para algum } i \in \{1, 2, \dots, m\}. \quad (1.20)$$

No caso de leis de conservação escalares, onde  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , temos que  $\lambda(U) = f'(U)$  e (1.20) se reduz a:

$$f'(U_l) > s > f'(U_r). \quad (1.21)$$

Uma outra condição de entropia para o caso escalar é devido a Oleinik onde a função de fluxo  $f$  deve satisfazer a seguinte definição.

**Definição 1.10** (Condição de Entropia de Oleinik). Se  $U : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$  é a solução entrópica, então todas as discontinuidades tem a propriedade seguinte:

$$\frac{f(U) - f(U_l)}{U - U_l} \geq s \geq \frac{f(U) - f(U_r)}{U - U_r}, \quad (1.22)$$

para todo  $U$  entre  $U_l, U_r \in \mathbb{R}$ .

Segundo [18] e [28], a condição de entropia que relaciona a velocidade do choque com as velocidades características à direita e à esquerda do próprio choque mostra-se na seguinte definição.

**Definição 1.11** (Condição de Entropia de Lax). Diz-se que um choque  $(U_l, U_r, s)$  do problema de Riemann satisfaz o critério de entropia de Lax se:

$$\begin{aligned} \lambda_i(U_r) &\leq s \leq \lambda_i(U_l), \\ \lambda_{i-1}(U_l) &< s < \lambda_{i+1}(U_r), \end{aligned} \quad (1.23)$$

para algum  $i = 1, 2, \dots, m$ . Neste caso, este choque é denominado de  $i$ -choque de Lax.

### 1.3.2 Critério de Viscosidade

A condição de entropia de viscosidade para sistemas de leis de conservação (1.9) aparece quando termos de viscosidade são considerados, então o sistema resultante fica acrescido de termos de segunda ordem, isto é:

$$U_t + [f(U)]_x = \varepsilon DU_{xx} \quad (1.24)$$

onde  $U = U(x, t) \in \mathbb{R}^n$ ,  $\varepsilon > 0$ , e  $D$  é uma matriz constante definida positiva, denominada *matriz de viscosidade*. Em geral, as soluções de (1.24) são suaves devido ao termo de viscosidade  $\varepsilon DU_{xx}$ , [26].

Do anterior, podemos estabelecer o seguinte critério de admissibilidade formulado para um sistema de leis de conservação.

**Definição 1.12.** Um choque  $(U_l, U_r, s)$  para o sistema de leis de conservação (1.9) é chamado admissível, segundo o critério de viscosidade em relação à matriz  $D$ , se existir uma onda viajante da equação parabólica (1.24) com velocidade  $s$  e extremos  $U_l$  em  $x = -\infty$  e  $U_r$  em  $x = +\infty$ .

No caso particular de uma lei de conservação escalar:

$$\begin{aligned} u_t + [f(u)]_x &= 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x), \end{aligned} \quad (1.25)$$

onde  $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $f \in C^2(\mathbb{R})$ , ao considerar a lei de conservação viscosa associada:

$$\begin{aligned} u_t + [f(u)]_x &= \varepsilon u_{xx}, \\ u(x, 0) &= u_0(x). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Temos o seguinte resultado.

**Proposição 1.13.** Seja  $u^\varepsilon$  solução de (1.26) suficientemente suave tal que satisfaz o princípio do máximo, isto é:

$$\|u^\varepsilon\|_\infty < C, \quad (1.27)$$

e seja uma função  $u$  tal que  $u^\varepsilon \rightarrow u$  quando  $\varepsilon \rightarrow 0^+$  em quase todo ponto em  $\mathbb{R} \times [0, +\infty)$ . Se a constante  $C > 0$  é independente de  $\varepsilon$ , então  $u$  é uma solução fraca de (1.25).

**Demonstração:** Seja  $\phi \in \mathcal{D}(\mathbb{R} \times [0, \infty))$  qualquer. Sendo  $u^\varepsilon$  uma solução suave de

(1.26), então multiplicando por  $\phi$  e integrando:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} u_t^\varepsilon \phi \, dx dt + \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} [f(u^\varepsilon)]_x \phi \, dx dt = \varepsilon \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} u_{xx}^\varepsilon \phi \, dx dt, \quad (1.28)$$

como  $\phi$  tem suporte compacto, podemos integrar por partes em (1.28) :

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} u_t^\varepsilon \phi \, dx dt = - \int_{-\infty}^\infty u(x, 0) \phi(x, 0) \, dx - \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty u^\varepsilon \phi_t \, dt, \quad (1.29a)$$

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} [f(u^\varepsilon)]_x \phi \, dx dt = - \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} f(u^\varepsilon) \phi_x \, dx dt, \quad (1.29b)$$

$$\varepsilon \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} u_{xx}^\varepsilon \phi \, dx dt = \varepsilon \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} u^\varepsilon \phi_{xx} \, dx dt. \quad (1.29c)$$

Somando (1.29a), (1.29b), (1.29c) e lembrando de (1.25) que  $u^\varepsilon(x, 0) = u_0(x)$  obtemos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u(x, 0) \phi(x, 0) \, dx + \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} [u^\varepsilon \phi_t + f(u^\varepsilon) \phi_x] \, dx dt = -\varepsilon \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} u^\varepsilon \phi_{xx} \, dx, \quad (1.30)$$

ora, de (1.27) e do Teorema da Convergência Dominada podemos tomar limite em (1.30) quando  $\varepsilon \rightarrow 0^+$  obtendo:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} u \phi_t \, dt + \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} f(u) \phi_x \, dx dt = - \int_{-\infty}^{+\infty} u(x, 0) \phi(x, 0) \, dx. \quad (1.31)$$

■

Seguindo [14], [26], vamos procurar uma solução de onda viajante para (1.26), isto é, existe uma função  $v$  tal que:

$$u(x, t) = v(\xi) \quad \text{onde} \quad \xi = \frac{x - st}{\varepsilon}. \quad (1.32)$$

Quando fazemos  $\varepsilon \rightarrow 0^+$ , a Proposição 1.13 garante que a solução de (1.26) converge para a solução da lei de conservação hiperbólica pois o *choque viscoso*  $v(\xi)$  é uma função de coordenada viajante  $\xi$  dado em (1.32).

Substituindo (1.32) em (1.26) obtemos a seguinte EDO:

$$\begin{aligned} v'(\xi) &= f(v(\xi)) - sv(\xi) - A, \quad A : \text{Constante de integração,} \\ v(\xi) &= u_l, \quad \text{quando} \quad \xi \rightarrow -\infty, \\ v(\xi) &= u_r, \quad \text{quando} \quad \xi \rightarrow +\infty, \\ u_l &\neq u_r. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Resolvendo a EDO (1.33) tem-se:

$$s = \frac{f(u_r) - f(u_l)}{u_r - u_l}, \quad A = \frac{f(u_l)u_r - f(u_r)u_l}{u_r - u_l}, \quad (1.34)$$

então (1.33) reduz-se a:

$$v'(\xi) = -sv(\xi) + f(v(\xi)) + \frac{f(u_l)u_r - f(u_r)u_l}{u_r - u_l}, \quad (1.35)$$

somando e subtraindo  $f(u_r)$  em (1.35) e do mesmo jeito para  $f(u_l)$  obtemos:

$$v'(\xi) = F(v) = f(v(\xi)) - f(u_r) - s(v(\xi) - u_r), \quad (1.36a)$$

$$v'(\xi) = F(v) = f(v(\xi)) - f(u_l) - s(v(\xi) - u_l). \quad (1.36b)$$

Observe que  $u_l$  e  $u_r$  são pontos singulares da EDO (1.36) pois  $F(u_l) = F(u_r) = 0$ . Além disso, pelo teorema de Picard [32], dada uma condição inicial temos que a EDO (1.36) possui solução única  $v$  não constante, a qual deve estar limitada entre os valores  $u_l$  e  $u_r$ . Afirmamos que a solução  $v$  é estritamente monótona, do contrário, existiria  $u^*$  entre  $u_l$  e  $u_r$  tal que  $F(u^*) = 0$ , então  $v$  não cumpriria as condições de fronteira (1.33), isto é, não poderíamos ligar os estados  $u_l$  e  $u_r$ .

Portanto, teremos os seguintes casos:

- Se  $u_l < v < u_r$ , então  $v'(\xi) > 0$ , portanto, de (1.36a) obtemos:

$$\frac{f(u) - f(u_r)}{u - u_r} < s = \frac{f(u_r) - f(u_l)}{u_r - u_l}, \quad (1.37)$$

e de (1.36b) tem-se:

$$\frac{f(u) - f(u_l)}{u - u_l} > s = \frac{f(u_r) - f(u_l)}{u_r - u_l}, \quad (1.38)$$

juntando as relações (1.37) e (1.38) obtemos:

$$\frac{f(u) - f(u_r)}{u - u_r} < \frac{f(u_r) - f(u_l)}{u_r - u_l} < \frac{f(u) - f(u_l)}{u - u_l}. \quad (1.39)$$

- Se  $u_r < v < u_l$ , então  $v'(\xi) < 0$ , portanto, de (1.36) obtemos:

$$\frac{f(u) - f(u_r)}{u - u_r} < s = \frac{f(u_r) - f(u_l)}{u_r - u_l}, \quad (1.40)$$

$$\frac{f(u) - f(u_l)}{u - u_l} > s = \frac{f(u_r) - f(u_l)}{u_r - u_l}, \quad (1.41)$$

novamente, a partir de (1.40) e (1.41) obtemos (1.39).

O exemplo acima mostra que a Condição de Entropia segundo o critério da viscosidade da Definição 1.12 para o caso escalar é equivalente à Condição de Entropia de Oleinik segundo à Definição 1.10 [26].

## 1.4 SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE RIEMANN

Para o Problema de Riemann (1.9) definimos as **curvas características** como segue:

$$\begin{aligned} x'(t) &= \lambda_i(U(x(t), t)), \\ x(0) &= x_0. \end{aligned} \tag{1.42}$$

Os autovalores  $\lambda_i = \lambda_i(u)$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  da matriz jacobiana  $f'(U)$  são denominadas **velocidades características**, mas (1.42) mostra que  $\lambda_i$  depende da solução do problema  $u$  que é desconhecida a-priori, portanto, não é possível resolver o sistema (1.42) para determinar as características e encontrar a solução de (1.9).

Em [19], na busca de solução do Problema de Riemann (1.9), supõe-se que as soluções são da forma  $u(x, t) = v(w(x, t))$ , onde:

$$\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \xrightarrow{w} \mathbb{R} \xrightarrow{v} \mathbb{R}^m \tag{1.43}$$

$$(x, t) \longmapsto \sigma = w(x, t) \longmapsto v(w(x, t)) = v(\sigma).$$

Então, substituindo  $u(x, t) = v(w(x, t))$  na lei de conservação de (1.9) obtemos:

$$\left[ \frac{\partial w}{\partial t} + f'(v(\sigma)) \frac{\partial w}{\partial x} \right] \frac{\partial v}{\partial \sigma}(\sigma) = 0, \tag{1.44}$$

supondo que  $v$  é solução da seguinte EDO:

$$\frac{dv}{d\sigma}(\sigma) = r_i(v(\sigma)) \quad \text{para algum } i \in \{1, \dots, m\}, \tag{1.45}$$

temos que (1.44) fica:

$$\left[ \frac{\partial w}{\partial t} + \lambda_i(v(\sigma)) \frac{\partial w}{\partial x} \right] r_i(v(\sigma)) = 0, \tag{1.46}$$

o que leva a resolver uma lei de conservação escalar para  $w$ :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + [f_i(w)]_x = 0, \tag{1.47}$$

com função de fluxo  $f_i(\sigma) := f_i(w)$  dada por:

$$f_i(\sigma) = \int_0^\sigma \lambda(v(\tau)) d\tau. \quad (1.48)$$

De (1.48) obtemos:

$$f'_i(\sigma) = \lambda(v(\sigma)) \quad \text{e} \quad f''_i(\sigma) = \nabla \lambda_i(v(\sigma))v'(\sigma), \quad (1.49)$$

então  $f''_i(\sigma)$  pode ser nulo ou não, isto motiva a caracterizar os autovalores  $\lambda_i$  do sistema hiperbólico que faremos na seção seguinte.

### 1.4.1 Campos Característicos

Considerando o sistema (1.7) estritamente hiperbólico, com autovalores  $\lambda_i(U)$  e autovetores respectivos  $r_i(U)$  para todo  $i = 1, 2, \dots, m$ , a *velocidade característica*  $\lambda_i(U)$  define um  $\lambda_i$ -campo, chamado  *$i$ -Campo Característico*, [34], [28].

**Definição 1.14.** Um  $i$ -campo característico é chamado **linearmente degenerado** em  $U^* \in \mathbb{R}^m$  se:

$$\nabla \lambda_i(U^*)r_i(U^*) = 0. \quad (1.50)$$

O  $i$ -campo característico é dito *linearmente degenerado* se é para todo  $U \in \mathbb{R}^m$ .

**Definição 1.15.** Um  $i$ -campo característico é chamado **genuinamente não linear** em  $U^* \in \mathbb{R}^m$  se:

$$\nabla \lambda_i(U^*)r_i(U^*) \neq 0. \quad (1.51)$$

O  $i$ -campo característico é dito *genuinamente não linear* se é para todo  $U \in \mathbb{R}^m$ .

O **plano de fase** é o espaço de vetores  $U = (u_1, u_2, \dots, u_m) \in \mathbb{R}^m$ . Observar que os campos característicos para um sistema linear hiperbólico com coeficientes constantes são linearmente degenerados.

Agora podemos classificar os autovalores do sistema (1.8), vemos que:

$$\nabla \lambda_1(U)r_1(U) = 0 \quad \text{e} \quad \nabla \lambda_2(U)r_2(U) = -\frac{2\theta_0}{(\theta + \theta_0)^3} \neq 0 \quad \text{para todo} \quad U \in \mathbb{R}^2, \quad (1.52)$$

então, o 1-campo característico é linearmente degenerado, enquanto o 2-campo característico é genuinamente não linear.

**Teorema 1.16.** Se todos os autovalores de  $f'$  do sistema (1.7) são genuinamente não lineares ou linearmente degenerados, então, existe  $\eta > 0$  tal que o problema de Riemann (1.9) tem solução para todo dado inicial  $(U_l, U_r)$  com  $|U_l - U_r| \leq \eta$ .

Pode-se encontrar a demonstração do Teorema 1.16 em [28].

Para resolver o problema de Riemann (1.9) no caso da função de fluxo  $f$  não ser linear, primeiro estudamos a parte da solução associado a um autovalor. Existem diferentes possibilidades. Se o autovalor  $\lambda_k$  é linearmente degenerado, então a condição de Rankine-Hugoniot é satisfeita, este tipo de descontinuidade é chamada **descontinuidade de contato**. Se  $\lambda_k$  é um autovalor genuinamente não linear, tem-se duas possibilidades:

$$\lambda_k(U_l) < \lambda_k(U_r) \quad \text{ou} \quad (1.53a)$$

$$\lambda_k(U_l) > \lambda_k(U_r). \quad (1.53b)$$

Nos casos (1.53a) e (1.53b) as soluções recebem os nomes de **onda de rarefação** e **onda de choque** respectivamente.

## 1.4.2 Ondas de Choque

Nesta seção descreveremos as soluções do Problema de Riemann (1.9) conhecidas como **ondas de choque**.

Seguindo [17], [29], [6]; dado um estado fixo  $u^* \in \mathbb{R}^m$ , consideraremos a curva de estados  $u$  que podem ser ligados pela direita a  $u^*$  pelo um  $i$ -choque. Definimos:

$$A(\theta) = \int_0^1 Df(\theta u + (1 - \theta)u^*) d\theta \quad \theta \in \mathbb{R}^m. \quad (1.54)$$

Como  $u \in H_i(u^*)$  tem-se:

$$s(u - u^*) = A(\theta)(u - u^*), \quad (1.55)$$

isto é,  $(u - u^*)$  é um autovetor pela direita da matriz  $A(u, u^*, \theta)$ . Então obtemos, [19]:

$$l_j(\theta)(u - u^*) = 0, \quad \text{para todo } j \neq i, \quad (1.56)$$

onde  $l_j$  ( $j = 1, \dots, m$ ) são os autovetores pela esquerda da matriz  $A(\theta)$  e além disso  $s = \lambda_i(\theta)$  autovalor respectivo. Então o sistema (1.56) oferece um sistema linear de  $m - 1$  equações com  $m$  variáveis (as componentes do vetor  $u \in \mathbb{R}^m$ ).

Seguindo [19], resolvemos o sistema linear (1.56) aplicando adequadamente o teorema

da função implícita e obtemos a curva:

$$\begin{aligned}\Phi_k(\sigma) &= u^* + \mu(\sigma)r_k(\Phi_k(\sigma)) \quad \text{para todo } k = 1, \dots, m; \\ \mu(0) &= 0, \\ \mu'(0) &= 1,\end{aligned}\tag{1.57}$$

e para valores próximos de zero de  $\sigma$  definimos a *i-curva de choque* passando através do estado fixo  $u^*$  como:

$$S_k(u^*)(\sigma) = \Phi_k(\sigma).\tag{1.58}$$

Observe que a curva  $S_k(u^*)$  passa pelo ponto  $u^*$  e é tangente ao autovetor  $r_k$ . Além disso, em [19] prova-se que  $H(u^*)$  é a união das curvas  $S_k(u^*)$   $k = 1, 2, \dots, m$ .

Com isso, seguindo [18], [14] temos a seguinte definição que é a versão do caso escalar para sistemas.

**Definição 1.17** (Choque admissível). Seja  $\lambda_i$  um *i*-campo característico genuinamente não linear. Um choque  $(U_l, U_r, s)$  é dito *admissível no sentido de Lax* se os estados  $U_l$  e  $U_r$  satisfazem a condição de Rankine Hugoniot segundo a Definição 1.6 e a condição de entropia de Lax da Definição 1.11.

Equivalentemente, deve-se cumprir  $U_r \in S_i(U_l)$  e a condição de entropia de Lax da Definição 1.11, [19]. O conjunto de estados  $U$  que são admissíveis com  $U_l$  serão denotados como o seguinte conjunto:

$$S_i^-(U_l) = \{U \in S_i(u_l) / \lambda_i(U) < s < \lambda_i(U_l)\}.\tag{1.59}$$

Isto é, um choque  $(U_l, U_r, s)$  é admissível se e somente se  $U_r \in S_i^-(U_l)$  para algum  $i \in \{1, \dots, m\}$ .

Portanto, dado um *i*-campo característico genuinamente não linear tal que o estado a direita  $U_r \in S_i^-(U_l)$ , definimos a solução do Problema de Riemann (1.9) como:

$$U(x, t) = \begin{cases} U_r, & x < st, \\ U_l, & x > st. \end{cases}\tag{1.60}$$

A solução (1.60) é chamada *i-onda de choque*.

### 1.4.3 Ondas de Rarefação

O Problema de Riemann (1.9) além de possuir soluções de tipo *ondas de choque*, também pode possuir soluções conhecidas como **ondas de rarefação** que estudaremos

nesta seção.

Seguindo [6], dado um estado  $u^* \in \mathbb{R}^n$  e um índice  $i \in \{1, \dots, m\}$ , sendo  $r_i(u^*)$  o  $i$ -ésimo autovetor da matriz jacobiana  $f'(u^*)$ . A curva integral do campo vetorial  $r_i$  através do estado  $u^*$  é chamado  $i$ -**curva de rarefação**. Isto é obtido resolvendo o problema de Cauchy:

$$\begin{aligned} \frac{dv(\sigma)}{d\sigma} &= r_i(v(\sigma)), \\ v(\sigma_0) &= u^*. \end{aligned} \quad (1.61)$$

Agora, dada  $R_i(u^*)$  solução de (1.61) uma  $i$ -curva de rarefação para um estado fixo  $u^*$ , definimos o seguinte conjunto:

$$R_i^+(u^*) = \{u \in R_i(u^*) / \lambda_i(u) > \lambda_i(u^*)\}. \quad (1.62)$$

Voltando ao Problema de Riemann, temos o seguinte resultado, [19].

**Teorema 1.18.** Suponhamos que para algum  $i \in \{1, \dots, m\}$  cumpre-se:

- a) O  $i$ -campo característico e genuinamente não linear.
- b)  $u_r \in R_i^+(u_l)$ .

Então existe uma solução contínua  $U$  para o problema de Riemann (1.9). Esta solução é chamada  **$i$ -onda de rarefação**.

**Demonstração:** Consideremos a seguinte notação  $v(\sigma) := R_i(u_l)(\sigma)$  para a  $i$ -curva de rarefação que passa pelo ponto  $u_l$  que é solução de (1.61).

Sejam  $w_l, w_r \in \mathbb{R}$  tal que  $u_l = v(w_l)$  e  $u_r = v(w_r)$ . Logo, sem perda de generalidade podemos supor  $w_l < w_r$ .

Da definição da função de fluxo (1.48), assim de (1.49) e da hipótese (b) temos que:

$$f'_i(w_l) = \lambda_i(v(w_l)) = \lambda_i(u_l) < \lambda_i(u_r) = \lambda_i(v(w_r)) = f'_i(w_r), \quad (1.63)$$

então temos que  $f''_i(\sigma) > 0$  o que implica que  $f_i$  é convexa. Portanto, a lei de conservação escalar (1.47) com função de fluxo convexa  $f_i$  dado por (1.48) tem uma solução de onda de rarefação, a qual tem a forma:

$$w(x, t) = \begin{cases} w_l, & \text{se } x < tf'_i(w_l) \\ G_i(x/t), & \text{se } tf'_i(w_l) < x < tf'_i(w_r), \\ w_r, & \text{se } x > tf'_i(w_r) \end{cases} \quad x \in \mathbb{R}, t > 0 \quad (1.64)$$

onde  $G_i = (f'_i)^{-1}$ . Logo  $U(x, t) = v(w(x, t))$  é a solução procurada do problema de Riemann (1.9) e  $v := R_i(u_l)$  é a curva integral passando por  $u_l$  solução de (1.61).

O caso  $w_l > w_r$  segue-se do anterior já que  $f_i$  é côncava. ■

Observe que uma onda de rarefação não cumpre a condição de entropia de Lax.

Por último, na seguinte seção descreveremos uma onda de contato.

#### 1.4.4 Descontinuidade de Contato

Começamos esta seção com o seguinte teorema relacionado a campos característicos linearmente degenerados [19]:

**Teorema 1.19.** Suponhamos que para algum  $i \in \{1, \dots, m\}$  o  $i$ -campo característico é linearmente degenerado. Então para  $u_l \in \mathbb{R}^m$  cumpre-se:

- a)  $R_i(u_l) = S_i(u_l)$ .
- b)  $\lambda_i(u) = \lambda_i(u_l)$  para todo  $u \in S_i(u_l)$ .

**Demonstração:** Seja  $v(\sigma) := R_i(u_l)(\sigma)$  a curva integral através de  $u_l$  solução de (1.61), então existe  $w_l \in \mathbb{R}$  tal que  $u_l = v(w_l)$ . Definamos:

$$g(\sigma) = \lambda_i(v(\sigma)),$$

então, como o  $i$ -campo característico é linearmente degenerado, obtemos:

$$g'(\sigma) = \nabla \lambda_i(v(\sigma))v'(\sigma) = \nabla \lambda_i(v(\sigma))r_i(v(\sigma)) = 0,$$

então  $g$  é constante ao longo de  $v(\sigma)$ . Então, para todo  $u \in S_i(u_l) = R_i(u_l)$  tem-se  $u = v(w)$  para algum  $w \in \mathbb{R}$  e do anterior temos que:

$$g(w) = g(w_l), \quad \text{e assim} \quad \lambda_i(u) = \lambda_i(u_l) \quad \text{para todo} \quad u \in S_i(u_l).$$

■

Agora, seja  $\lambda_i$  um  $i$ -campo linearmente degenerado e um choque  $(U_r, U_l, s)$  tal que  $U_r \in S_i(U_l)$ . Então, para o Problema de Riemann (1.9) temos a seguinte solução:

$$U(x, t) = \begin{cases} U_r, & x \leq st, \\ U_l, & x \geq st, \end{cases} \quad (1.65)$$

do Teorema 1.19 temos  $s = \lambda_i(U_l) = \lambda_i(U_r)$ . A reta  $x = st$  é chamada  **$i$ -descontinuidade de contato**.

Agora vamos a encontrar a solução do problema de Riemann para o exemplo (1.8). Já vimos em (1.52) que  $\lambda_1$  é um 1-campo característico linearmente degenerado e  $\lambda_2$  é um 2-campo genuinamente não linear. Vamos analisar cada caso:

Como  $\lambda_1$  é linearmente degenerado, então temos uma descontinuidade de contato dado por:

$$U(x, t) = \begin{cases} U_r, & x \leq 0, \\ U_l, & x \geq 0, \end{cases} \quad (1.66)$$

Agora vamos analisar  $\lambda_2$ , já que é genuinamente não linear então pode ocorrer uma onda de rarefação ou uma onda de choque. Dado um estado fixo  $U_l \in \mathbb{R}^m$ , para que aconteça choque deve-se cumprir (1.18) ou (1.19), isto é,  $U_r \in H_1(U_l)$  ou  $U_r \in H_2(U_l)$ . Além disso, para que  $\lambda_2$  possa gerar um choque admissível, tem-se que cumprir a condição de entropia de Lax da Definição 1.11.

- Se  $U_r \in H_1(U_l)$ , então  $U_r = \begin{pmatrix} \theta_l \\ \eta_r \end{pmatrix}$  e desde que  $\lambda_2(U_r) = \frac{\theta_0}{(\theta_l + \theta_0)^2}$  temos que  $\lambda_2(U_r) > 0 = s_1$  o que é uma contradição. Portanto,  $U_r \notin H_1(U_l)$ .
- Se  $U_r \in H_2(U_l)$  temos que  $U_r = \begin{pmatrix} \theta_r \\ \eta_l \end{pmatrix}$  e assim  $\lambda_2(U_r) = \frac{\theta_0}{(\theta_r + \theta_0)^2}$ . Logo, para obter uma onda de choque devemos ter:  $\lambda_2(U_r) < \lambda_2(U_l)$  o que implica  $\theta_r > \theta_l$ .

Logo, com a condição  $\theta_r > \theta_l$  e  $s := s_2 = \frac{\theta_0}{(\theta_r + \theta_0)(\theta_l + \theta_0)}$  obtemos:

$$\lambda_2(U_l) = \frac{\theta_0}{(\theta_l + \theta_0)^2} > s > \frac{\theta_0}{(\theta_r + \theta_0)^2} = \lambda_2(U_r), \quad (1.67)$$

além disso:

$$\lambda_1(U_l) = 0 < s, \quad (1.68)$$

isto é, (1.67) e (1.68) mostram que se  $U_r \in H_2(U_l)$  e  $\theta_r > \theta_l$  temos que se cumpre a condição de entropia de Lax, portanto, é um choque admissível e a onda de choque é:

$$U(x, t) = \begin{cases} U_r, & x \leq s_2 t, \\ U_l, & x \geq s_2 t. \end{cases} \quad (1.69)$$

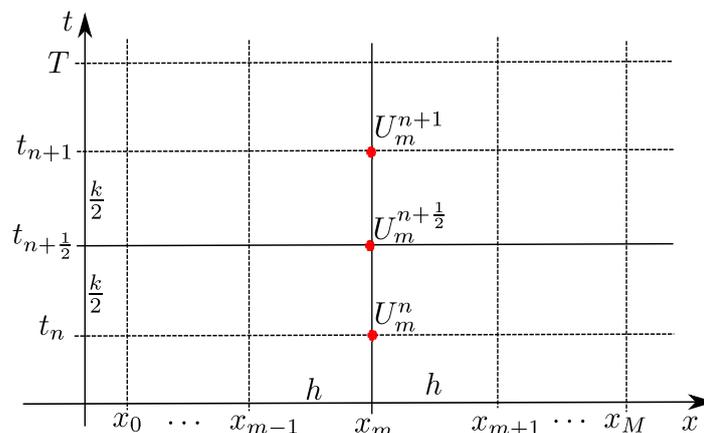
No caso contrário, isto é, se  $\theta_r < \theta_l$ , teríamos uma onda de rarefação.

## 2 ESQUEMA DE DIFERENÇAS FINITAS

Infelizmente não é possível resolver de forma analítica qualquer equação hiperbólica não linear, mas existem métodos numéricos como Elementos Finitos ou Diferenças Finitas que nos permitem encontrar uma aproximação da solução exata. Nós estudaremos o método de Diferenças Finitas por ser mais comum. O método será aplicado a um problema unidimensional, neste caso o método de Elementos Finitos não mostra nenhuma vantagem em relação ao método de Diferenças Finitas.

Neste capítulo veremos brevemente três importantes conceitos no esquema de diferenças finitas: consistência, convergência e estabilidade. No final do capítulo apresentaremos sem demonstração o teorema de equivalência de Lax-Richtmayer que relaciona estes conceitos.

Do Capítulo 1 sabemos que nossa região de estudo é um retângulo  $R = \Omega \times [0, T]$  contida no semiplano superior  $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ . Seja  $\Omega = [x_0, x_M] \subset \mathbb{R}$  e seja  $(x, t) \in R$  onde  $x$  denota a variável espacial e  $t$  a variável temporal. Subdividimos os intervalos  $[x_0, x_M]$  e  $[0, T]$  em  $M$  e  $N$  subintervalos de comprimentos  $h = \Delta x = (x_M - x_0)/M$  e  $k = \Delta t = T/N$  respectivamente, formando-se assim uma malha na região  $R$  como mostra a Figura 2.1.



**Figura 2.1:** Representação da malha do esquema de diferenças finitas.

Seguindo [30], denotaremos os pontos da malha como  $(x_m, t_n) = (x_0 + hm, nk)$ . Então, o valor de uma função  $u$  num ponto da malha  $(x_m, t_n)$  será denotado por  $u_m^n = u(x_m, t_n)$ .

Descreveremos brevemente o esquema de diferenças para a seguinte equação:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) - 1, \quad x \in [x_0, x_M], t \in [0, T]. \quad (2.1)$$

O esquema para (2.1) será descrito com maior detalhe no Capítulo 4, mas por enquanto, para enxergar melhor o método de diferenças finitas a equação (2.1) será nosso modelo a trabalhar.

A idéia básica do método é substituir as derivadas espaciais pelas suas aproximações em diferenças finitas, as quais podem ser feitas de muitas maneiras. Neste trabalho utilizamos o método implícito de Crank–Nicolson, o qual estabelece que as derivadas espaciais no ponto  $(x_m, t_{n+\frac{1}{2}})$  é a média das derivadas espaciais nos pontos  $(x_m, t_n)$  e  $(x_m, t_{n+1})$ , isto é:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_m, t_{n+\frac{1}{2}}) \approx \frac{u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}}{2h^2} + \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{2h^2}. \quad (2.2)$$

A derivada temporal será aproximada mediante diferença central com passo de comprimento  $k/2$ , isto é:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_m, t_{n+\frac{1}{2}}) \approx \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k}. \quad (2.3)$$

Substituindo (2.2) e (2.3) em (2.1) e considerando já inclusas as condições de fronteira, obtemos o seguinte **esquema de diferenças finitas**:

$$B_1 U^{n+1} = B_0 U^n + F^n, \quad (2.4)$$

onde as matrizes  $B_1, B_0$  e o vetor  $F^n$  serão dadas em detalhe no Capítulo 4. Além disso, a matriz  $B_1$  é diagonal dominante e portanto é invertível, [7].

Aqui definimos os vetores:

$$U^n = \{U_m^n / m \in J_\Omega\} \quad \text{e} \quad u^n = \{u_m^n / m \in J_\Omega\}, \quad (2.5)$$

onde  $U^n$  é a solução do esquema (2.5) em cada passo de tempo “  $n$  ” e  $J_\Omega$  representa o conjunto de índices dos pontos  $u(x_m, t_n)$  em  $\Omega$  que são desconhecidos. Isto é, se as condições de fronteira em  $x_0$  e  $x_M$  são tipo Dirichlet então  $J_\Omega = \{1, 2, \dots, M - 1\}$ , se as condições de fronteira são tipo Neuman em  $x_0$  e  $x_M$  então  $J_\Omega = \{0, 1, \dots, M\}$ .

Se espera que em cada passo de tempo “  $n$  ” o vetor  $U^n$  seja uma boa aproximação

do vetor  $u^n$  onde  $u$  representa solução exata da equação (2.1), isto é:

$$U^n \approx u^n \iff U_m^n \approx u_m^n \text{ para todo } m \in J_\Omega. \quad (2.6)$$

Portanto, para comparar os valores  $U_m^n$  com os valores reais da solução  $u_m^n = u(x_m, t_n)$  do problema (2.1) em cada instante de tempo “ n ”, seguindo [20] e [23], faremos uso da **norma em  $l_2$** , isto é:

$$\| U^n - u^n \|_2 = \left\{ h \sum_{m \in J_\Omega} |U_m^n - u_m^n|^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (2.7)$$

Na seção seguinte, estudaremos brevemente os três conceitos importantes associados a um esquema de diferenças finitas: consistência, estabilidade e convergência.

## 2.1 CONSISTÊNCIA, ESTABILIDADE E CONVERGÊNCIA

Seguindo [23], consideremos o seguinte esquema de equações diferenciais parciais:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = L(u) \text{ em } \Omega \times (0, T), \quad (2.8a)$$

$$g(u) = g_0 \text{ em } \partial\Omega_1 \subset \partial\Omega, \quad (2.8b)$$

$$u = u_0 \text{ em } \Omega \times \{t = 0\}, \quad (2.8c)$$

onde:

- O operador  $L$  depende das derivadas parciais espaciais de  $u$  mas  $L$  não depende da derivada temporal.
- $g(u)$  descreve o comportamento de  $u$  na fronteira  $\partial\Omega$  o parte de ela  $\partial\Omega_1 \subset \partial\Omega$ .
- $u_0$  é o comportamento de  $u$  no instante inicial na região  $\Omega$ , isto é, em  $t = 0$ .

O esquema de diferenças finitas associado a (2.8) é dado por:

$$B_1 U^{n+1} = B_0 U^n + F^n, \quad (2.9)$$

onde as matrizes  $B_0$  e  $B_1$  não dependem de  $n$  pois por hipótese, o operador  $L$  não depende do tempo. As matrizes  $B_0$  e  $B_1$  podem depender dos pontos da malha onde são aplicadas.

O vetor  $F^n$  é chamado *termo livre* e pode depender do espaço e tempo.

Para o esquema (2.9) supomos que a matriz  $B_1$  é invertível, logo:

$$U^{n+1} = B_1^{-1}[B_0U^n + F^n]. \quad (2.10)$$

Além disso, supomos que a matriz  $B_1$  é *bem condicionada*, isto é, existe uma constante  $K > 0$  tal que:

$$\| B^{-1} \| \leq K \Delta t, \quad (2.11)$$

para qualquer norma matricial  $\| \cdot \|$ .

**Definição 2.1.** O *Erro de Truncamento* é definido como:

$$T^n = B_1u^{n+1} - (B_0u^n + F^n), \quad (2.12)$$

onde  $u$  é uma solução exata do problema (2.8).

O erro de truncamento é uma medida de como a equação em diferenças aproxima a equação diferencial parcial localmente [20].

Um esquema numérico é dito ser consistente com a EDP se no limite quando  $h$  e  $k$  tendem a zero, a equação discretizada aproxima-se da equação original. Em termos matemáticos a consistência fica do seguinte modo [23].

**Definição 2.2.** O esquema (2.9) é dito **consistente** com o problema (2.8) se e somente se:

$$T_j^n \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad \Delta t \rightarrow 0 \quad \text{para todo} \quad j \in J_\Omega, \quad (2.13)$$

para toda solução  $u$  de (2.8).

**Definição 2.3.** Sejam  $p$  e  $q$  os maiores inteiros tais que existe uma constante positiva  $C$  que satisfaz:

$$|T_j^n| \leq C [(\Delta t)^p + (\Delta x)^q] \quad \text{quando} \quad \Delta t \rightarrow 0, \quad \forall j \in J_\Omega, \quad (2.14)$$

para toda solução  $u$  do sistema (2.8). Então, o esquema (2.9) é dito de *ordem de aproximação*  $(p, q)$ .

Agora, passamos a interpretar a relação (2.6), a qual expressa o desejo de que a solução aproximada  $U^n$  estivesse tão próxima da solução exata  $u^n$ , esta ideia é dada em termos matemáticos como segue:

**Definição 2.4.** Dizemos que a solução  $U^n$  do esquema de diferenças finitas (2.9) é **convergente** à solução  $u^n$  de (2.8) na norma  $\| \cdot \|$  se e somente se:

$$\| U^n - u^n \| \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad \Delta t \rightarrow 0, \quad n\Delta t \rightarrow t \in (0, T], \quad (2.15)$$

para todo  $u^0$  para o qual (2.8) esteja bem posto.

Observe que a consistência é uma condição necessária para convergência, pois ela nos diz quão bom o esquema de diferenças finitas representa a EDP original [16].

Outro conceito importante é a estabilidade, que descreve como uma perturbação na solução é amplificada ao longo da simulação. O esquema que não amplifica muito as perturbações está em regime estável. Quando essas amplificações existem, o erro cresce a cada passo de tempo e a solução geralmente “explode”. Como esse crescimento é puramente relativo ao método numérico, o conceito de estabilidade está relacionado ao crescimento ou diminuição dos erros introduzidos nos cálculos, [16]. Isto motiva a seguinte definição.

**Definição 2.5.** Sejam  $V^n$  e  $W^n$  soluções de (2.10) com diferentes pontos iniciais  $V^0$  e  $W^0$  e mesmo termo livre  $F^n$ . Dizemos que o esquema de diferenças finitas é **estável** na norma  $\| \cdot \|$  e para uma malha dada se existir uma constante  $K > 0$  tal que:

$$\| V^n - W^n \| \leq K \| V^0 - W^0 \|, \quad n\Delta t \leq T, \quad (2.16)$$

onde a constante  $K$  não depende de  $V^0, W^0$  nem de  $\Delta t$  da malha dada.

**Definição 2.6.** Dizemos que o problema (2.8) está *bem posto* numa norma dada  $\| \cdot \|$ , se para todo  $h$  suficientemente pequeno cumprem-se as seguintes condições:

- Existe uma solução para todo dado  $u^0$  para a qual  $\| u \|$  é limitado independente de  $h$ .
- Existe uma constante  $K > 0$  tal que para qualquer par de soluções  $v$  e  $w$  tem-se:

$$\| v^n - w^n \| \leq K \| v^0 - w^0 \| \quad t_n \leq T. \quad (2.17)$$

As definições de consistência, convergência e estabilidade foram relacionadas no seguinte teorema devido a Lax em 1953, [23].

**Teorema 2.7** (Teorema de Equivalência de Lax-Richtmayer). Um esquema de diferenças finitas consistente para um problema evolutivo linear bem posto e uniformemente bem

condicionado segundo (2.11), então a estabilidade do esquema é necessária e suficiente para a convergência.

A demonstração do Teorema 2.7 pode ser encontrada em [23]. Mencionamos que o Teorema 2.7 é válido só para problemas lineares como é o caso da EDP (2.1). Para problemas não lineares não temos um teorema que garanta a convergência, [31]. Porém, baseados no Teorema 2.7 faremos nossas experiências numéricas no Capítulo 5 para uma EDP não linear. Uma aplicação do teorema para ao problema (2.1) será descrita na seguinte seção.

## 2.2 ANÁLISE DE ERRO

Nesta seção vamos estudar a análise de erro para o método de Crank–Nicolson aplicado à equação (2.1), para isto, primeiro temos que ver se o método é convergente.

Começamos o estudo desenvolvendo o polinômio de Taylor em relação ao tempo no ponto  $(x_m, t_{n+\frac{1}{2}})$ :

$$\begin{aligned} u_m^{n+1} &= u(x_m, t_{n+1}) = u(x_m, t_n + k) = u(x_m, t_n + \frac{k}{2} + \frac{k}{2}), \\ &= \left[ u + \frac{k}{2}u_t + \frac{1}{2} \left(\frac{k}{2}\right)^2 u_{tt} + \frac{1}{6} \left(\frac{k}{2}\right)^3 u_{ttt} + \dots \right]_m^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Similarmente obtemos:

$$\begin{aligned} u_m^n &= u(x_m, t_n) = u(x_m, t_n + \frac{k}{2} - \frac{k}{2}), \\ &= \left[ u - \frac{k}{2}u_t + \frac{1}{2} \left(\frac{k}{2}\right)^2 u_{tt} - \frac{1}{6} \left(\frac{k}{2}\right)^3 u_{ttt} + \dots \right]_m^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Subtraindo (2.19) de (2.18) temos:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_m, t_{n+\frac{1}{2}}) \approx \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} = \left[ u_t + \frac{k^2}{24}u_{ttt} + \dots \right]_m^{n+\frac{1}{2}}. \quad (2.20)$$

Agora fazemos o polinômio de Taylor em relação à variável  $x$ :

$$u(x+h, t) = u + hu_x + \frac{h^2}{2}u_{xx} + \frac{h^3}{6}u_{xxx} + \frac{h^4}{24}u_{xxxx} + \frac{h^5}{120}u_{xxxxx} + \frac{h^6}{720}u_{xxxxxx} + \dots, \quad (2.21)$$

$$u(x-h, t) = u - hu_x + \frac{h^2}{2}u_{xx} - \frac{h^3}{6}u_{xxx} + \frac{h^4}{24}u_{xxxx} - \frac{h^5}{120}u_{xxxxx} + \frac{h^6}{720}u_{xxxxxx} + \dots, \quad (2.22)$$

somando (2.21) e (2.22) obtemos:

$$u(x+h, t) - 2u(x, t) + u(x-h, t) = h^2 u_{xx} + \frac{h^4}{12} u_{xxxx} + \frac{h^6}{360} u_{xxxxxx} + \dots \quad (2.23)$$

Vamos a considerar a seguinte notação:

$$\delta_x^2 u(x, t) = u(x+h, t) - 2u(x, t) + u(x-h, t). \quad (2.24)$$

Na relação (2.23) aplicada no ponto  $(x_m, t_n)$ , desenvolvemos a parte direita o polinômio de Taylor em relação a  $t$  ao redor do ponto  $(x_m, t_{n+\frac{1}{2}})$ :

$$\begin{aligned} \delta_x^2 u(x_m, t_n) &= \left[ h^2 u_{xx} + \frac{h^4}{12} u_{xxxx} + \frac{h^6}{360} u_{xxxxxx} + \dots \right]_m^{n+\frac{1}{2}} + \\ &+ \frac{k}{2} \left[ -h^2 u_{xxt} - \frac{h^4}{12} u_{xxxxt} - \frac{h^6}{360} u_{xxxxxt} + \dots \right]_m^{n+\frac{1}{2}} + \\ &+ \frac{k^2}{8} \left[ h^2 u_{xxtt} + \frac{h^4}{12} u_{xxxxt} + \frac{h^6}{360} u_{xxxxxt} + \dots \right]_m^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Similarmente para o ponto  $(x_m, t_{n+1})$  desenvolvemos a parte direita de (2.23) com o polinômio de Taylor em relação a  $t$  ao redor do ponto  $(x_m, t_{n+\frac{1}{2}})$ :

$$\begin{aligned} \delta_x^2 u(x_m, t_{n+1}) &= \left[ h^2 u_{xx} + \frac{h^4}{12} u_{xxxx} + \frac{h^6}{360} u_{xxxxxx} + \dots \right]_m^{n+\frac{1}{2}} + \\ &+ \frac{k}{2} \left[ -h^2 u_{xxt} + \frac{h^4}{12} u_{xxxxt} + \frac{h^6}{360} u_{xxxxxt} + \dots \right]_m^{n+\frac{1}{2}} + \\ &+ \frac{k^2}{8} \left[ h^2 u_{xxtt} + \frac{h^4}{12} u_{xxxxt} + \frac{h^6}{360} u_{xxxxxt} + \dots \right]_m^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Logo:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_m, t_{n+\frac{1}{2}}) \approx \frac{\frac{1}{2} \delta_x^2 u(x_m, t_{n+1}) + \left(1 - \frac{1}{2}\right) \delta_x^2 u(x_m, t_n)}{h^2}. \quad (2.27)$$

Portanto, o erro de truncamento no ponto  $(x_m, t_{n+\frac{1}{2}})$  é:

$$T_m^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\partial u}{\partial t}(x_m, t_{n+\frac{1}{2}}) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_m, t_{n+\frac{1}{2}}) - 1. \quad (2.28)$$

Substituindo (2.20) e (2.27) em (2.28) obtemos:

$$T_m^{n+\frac{1}{2}} = [u_t - u_{xx} - 1]_m^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12} [(\Delta x)^2 u_{xxxx} + (\Delta t)^2 u_{ttt}]_m^{n+\frac{1}{2}} + \dots \quad (2.29)$$

A expressão (2.29) nos diz que o método de Crank–Nicolson é de segunda ordem em  $k = \Delta t$  e  $h = \Delta x$ . Além disso, observe que quando  $h$  e  $k$  tendem para zero temos que o erro de truncamento tende para a EDP original, assim temos que o método implícito

de Crank–Nicolson é consistente com a equação (2.1). Em [23] pode-se encontrar que o método de Crank–Nicolson é incondicionalmente estável. Então, pelo Teorema 2.7 o esquema (2.4) é convergente à solução exata de (2.1).

Portanto, se mantivermos  $\Delta t$  constante, podemos fazer a análise de erro em relação à variação de  $\Delta x$ . A partir de (2.29) temos para cada  $\Delta x$  que a solução exata  $u$  no tempo “ $t_n$ ”, denotada por  $u^n$ , pode ser escrita como segue:

$$u^n = U_{\Delta x}^n + \mathcal{O}((\Delta x)^2), \quad (2.30)$$

onde  $U_{\Delta x}^n$  representa a solução aproximada  $U^n$  obtida pelo esquema de diferenças finitas de Crank–Nicolson (2.4) com comprimento de subintervalo  $\Delta x$ .

Considerando  $\Delta x = h, h/2$  e  $h/4$  obtemos:

$$u^n = U_h^n + \mathcal{O}(h^2). \quad (2.31a)$$

$$u^n = U_{\frac{h}{2}}^n + \mathcal{O}\left(\frac{h}{2}\right)^2 = U_{\frac{h}{2}}^n + \frac{1}{4}\mathcal{O}(h^2). \quad (2.31b)$$

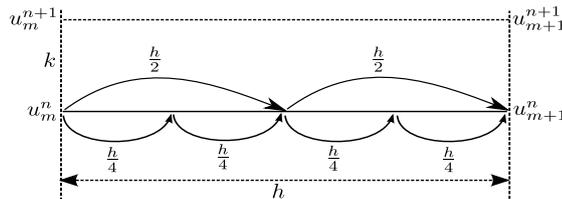
$$u^n = U_{\frac{h}{4}}^n + \mathcal{O}\left(\frac{h}{4}\right)^2 = U_{\frac{h}{4}}^n + \frac{1}{16}\mathcal{O}(h^2). \quad (2.31c)$$

Como não conhecemos a solução exata mas sempre é a mesma para qualquer  $\Delta x$ , então subtraindo (2.31b) de (2.31a) e (2.31c) de (2.31b) obtemos:

$$\|U_{\frac{h}{2}}^n - U_h^n\| = \frac{3}{4}\mathcal{O}(h^2). \quad (2.32a)$$

$$\|U_{\frac{h}{4}}^n - U_{\frac{h}{2}}^n\| = \frac{3}{16}\mathcal{O}(h^2) \quad (2.32b)$$

Observe que na solução aproximada  $U_{\frac{h}{2}}^n$  temos o dobro de pontos que em  $U_h^n$  segundo pode deduzir-se da Figura 2.2, então, para que (2.32a) tenha sentido consideramos os mesmos pontos em  $U_{\frac{h}{2}}^n$  e  $U_h^n$ . O mesmo acontece para  $U_{\frac{h}{4}}^n$  e  $U_{\frac{h}{2}}^n$  e assim sucessivamente.



**Figura 2.2:** Discretização para a análise de erro.

As expressões (2.32) são chamadas **Erro Relativo** e denotada por  $E_{\Delta x}$ . Em base ao Erro Relativo faremos a análise de erro para o método de Crank–Nicolson, o qual é aplicado no Capítulo 4 e Capítulo 5. A Tabela 2.1 mostra os valores do Erro Relativo  $E_{\Delta x}$  para os  $\Delta x$  indicados na primeira coluna.

**Tabela 2.1:** Erro Relativo para o método de Crank–Nicolson

$\Delta x$	$E_{\Delta x}$
$h$	$\  U_{2\frac{h}{2}}^n - U_h^n \  \quad \frac{3}{4}\mathcal{O}(h^2)$
$\frac{h}{2}$	$\  U_{4\frac{h}{4}}^n - U_{2\frac{h}{2}}^n \  \quad \frac{3}{16}\mathcal{O}(h^2)$
$\frac{h}{4}$	$\  U_{8\frac{h}{8}}^n - U_{4\frac{h}{4}}^n \  \quad \frac{3}{64}\mathcal{O}(h^2)$
$\frac{h}{8}$	$\  U_{16\frac{h}{16}}^n - U_{8\frac{h}{8}}^n \  \quad \frac{3}{256}\mathcal{O}(h^2)$

Do mostrado na Tabela 2.1, vemos que  $E_{\Delta x}/E_{\Delta x/2} = 4$ , isto é, esperamos que o  $E_{\Delta x/2}$  seja a quarta parte do erro  $E_{\Delta x}$ .

Vemos que para resolver a EDP (2.8) por um esquema de diferenças finitas, obtemos de maneira natural um sistema de equações a ser resolvido. Para resolver o sistema de equações resultante usaremos o método de Newton descrito na seção seguinte.

## 2.3 MÉTODO DE NEWTON

Consideremos o seguinte problema:

$$\text{Encontrar } x^* \in \mathbb{R}^n \text{ tal que: } F(x^*) = 0, \quad (2.33)$$

onde  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  é uma função não linear.

Supondo que  $F \in C^1(D)$ , isto é,  $F$  é uma função continuamente diferenciável em  $D$ . Denotamos também por  $J_F(x)$  à matriz jacobiana da função  $F$  aplicado no ponto  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$  e o qual é definido como segue:

$$(J_F(x))_{ij} = \left( \frac{\partial F_i}{\partial x_j}(x) \right) \quad \text{para todo } i, j = 1, 2, \dots, n;$$

O método de Newton pode ser descrito como segue:

**Algoritmo 1** (Algoritmo Método de Newton).

**Passo 1** Dar um ponto inicial  $x_0 \in \mathbb{R}^n$ , uma tolerância  $tol$  e fazer  $k = 0$ .

**Passo 2** Resolver o sistema linear:  $J(x_k) d_k = -F(x_k)$ .

**Passo 3** Fazer  $x_{k+1} = x_k + d_k$ .

**Passo 4** Se  $\|d_k\| < tol$  então a solução é  $x_k$ .

Caso contrário fazer  $k = k + 1$  e voltar ao Passo (2).

Observar que em cada iteração precisa-se a matriz jacobiana  $J(x_k)$ .

**Teorema 2.8.** Seja  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  uma função de classe  $C^2$  num conjunto aberto e convexo  $D \subset \mathbb{R}^n$  que contém  $x^*$ . Suponhamos que  $J_F(x^*)$  exista e que além disso existem constantes positivas  $R, C$  e  $L$  tal que :

$$\|J_F(x^*)\| \leq C, \quad (2.34)$$

e

$$\|J_F(x) - J_F(y)\| \leq L \|x - y\| \quad \text{para todo } x, y \in B(x^*, R). \quad (2.35)$$

Então existe  $r > 0$  tal que para qualquer ponto inicial  $x_0 \in B(x^*, r)$  a sequência gerada pelo algoritmo (1) converge para a solução  $x^*$  com:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \|x_k - x^*\|^2. \quad (2.36)$$

**Demonstração:** Afirmamos que existe  $r > 0$  tal que  $J_F(x_0)$  é invertível. De fato, para qualquer  $x_0 \in B(x^*, R)$  temos das hipóteses que:

$$\begin{aligned} \|I - J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0)\| &= \|J_F^{-1}(x^*)(J(x^*) - J_F(x_0))\|, \\ &\leq \|J_F^{-1}(x^*)\| \|J_F(x^*) - J_F(x_0)\|, \\ &\leq CL \|x^* - x_0\|. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Seguindo [27], mostraremos que o raio espectral da matriz  $\|I - J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0)\|$  seja menor que 1, onde:

$$\rho(P) = \inf_{\|x\|=1} \|Px\|.$$

Em (2.37) escolhemos  $r = \min\{R, \frac{1}{2CL}\}$ , obtendo para qualquer  $x_0 \in B(x^*, r)$ :

$$\rho(I - J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0)) \leq \|I - J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0)\| \leq \frac{1}{2}. \quad (2.38)$$

Então a matriz  $I - (I - J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0)) = J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0)$  é invertível, além disso:

$$\| (J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0))^{-1} \| \leq \frac{1}{1 - \| I - J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0) \|}. \quad (2.39)$$

Assim, existe  $r = \frac{1}{2CL} > 0$  tal que para qualquer  $x_0 \in B(x^*, r)$  temos que  $J_F(x_0)$  é invertível.

Provaremos que para qualquer  $x_0 \in B(x^*, r)$  temos que a sequência gerada pelo Algoritmo 1 converge a  $x^*$ .

Então de (2.38) conclui-se:

$$\frac{\| J_F^{-1}(x^*) \|}{1 - \| I - J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0) \|} \leq 2 \| J_F^{-1}(x^*) \| \leq 2C. \quad (2.40)$$

Como  $J_F^{-1}(x_0) = J_F^{-1}(x_0)J_F(x^*)J_F^{-1}(x^*)$ , então de (2.39) e (2.40) obtemos:

$$\| J_F^{-1}(x_0) \| \leq \frac{\| J_F^{-1}(x^*) \|}{1 - \| I - J_F^{-1}(x^*)J_F(x_0) \|} \leq 2C. \quad (2.41)$$

Desenvolvendo o polinômio de Taylor ao redor de  $x_0$ , [21], temos que:

$$F(x^*) = F(x_0) + J_F(x_0)(x^* - x_0) + r(x^* - x_0), \quad (2.42)$$

onde  $r(x^* - x_0)$  é o resto que cumpre:

$$\lim_{x_0 \rightarrow x^*} \frac{r(x^* - x_0)}{\| x^* - x_0 \|^2} = 0. \quad (2.43)$$

De (2.43) e como  $F(x^*) = 0$ , obtemos:

$$\begin{aligned} \| x_1 - x^* \| &\leq \| x_0 - J_F^{-1}(x_0) - x^* + J_F^{-1}(x_0)F(x^*) \|, \\ &\leq \| J_F^{-1}(x_0) \| \| F(x_0) - F(x^*) + J_F(x_0)(x_0 - x^*) \|, \\ &\leq CL \| x_0 - x^* \|^2. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Portanto, (2.44) prova (2.36) para  $k = 0$ . Além disso, como  $x_0 \in B(x^*, r)$  podemos concluir de (2.44) que  $x_1 \in B(x^*, r)$ .

Assumindo que o teorema é válido para  $k$  e provando de um modo similar para  $k + 1$  conclui-se a demonstração. ■

Do Teorema 2.8 podemos deduzir que uma característica pela qual o método de Newton não é maravilhoso, é porque tem o problema de que a vizinhança onde o método converge é pequena.

No seguinte capítulo apresentaremos uma variação do método de Newton para resolver um sistema de equações não lineares. Outras modificações podem ser vistas em [27].

### 3 *PROBLEMA DE COMPLEMENTARIDADE NÃO LINEAR*

Uma grande variedade de problemas que aparecem em muitos campos da ciência, como por exemplo, Economia, Teoria de Jogos, Programação Matemática, Mecânica, Teoria da Elasticidade, Engenharia, Física, podem ser formulados como Problemas de Complementaridade (PC) [15]. O estudo de resolver numericamente os PC tem muitos enfoques e entre os mais comuns temos o uso de funções de mérito ou ver o PC como um sistema de equações não lineares. Neste último sentido, é desenvolvido em [24] o Algoritmo de Direções Admissíveis para Problemas de Complementaridade Não Linear (FDA–NCP), o qual é uma modificação do método de Newton feito no capítulo anterior.

O objetivo principal deste capítulo é descrever o algoritmo FDA–NCP, o qual gera uma sequência de pontos que cumprem duas condições: uma condição de viabilidade e uma condição de decrescimento para uma função potencial associada ao problema de complementaridade. Além disso se apresentam os teoremas que garantem a convergência do algoritmo.

No Capítulo 4 e Capítulo 5 serão estudados dois modelos de equações em derivadas parciais de tipo parabólico, os quais podem ser tratados como problemas de complementaridade linear e não linear respectivamente, portanto, será possível aplicar o algoritmo FDA–NCP apresentado neste capítulo.

#### 3.1 CONCEITOS BÁSICOS

Nesta seção apresentamos as definições que ajudarão um melhor entendimento do algoritmo FDA–NCP.

**Definição 3.1.** Seja  $F : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  uma função vetorial. O Problema de comple-

mentaridade é:

$$\begin{aligned} \text{Encontrar } x \in \mathbb{R}^n \text{ tal que:} \\ x \geq 0, \quad F(x) \geq 0, \quad \text{e,} \quad x \bullet F(x) = 0 \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde  $x \geq 0 \iff x_i \geq 0$  para todo  $1 \leq i \leq n$ ,  $F(x) \geq 0 \iff F_i(x) \geq 0$  para todo  $1 \leq i \leq n$  e  $x \bullet F(x) = \begin{pmatrix} x_1 F_1(x) \\ \vdots \\ x_n F_n(x) \end{pmatrix}$  é o produto de Hadamard.

Quando  $F$  é uma função afim  $F(x) = Ax + b$ ,  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  e  $b \in \mathbb{R}^n$ , temos um *Problema de Complementaridade Linear* (PCL), caso contrário temos um *Problema de Complementaridade Não Linear* (PCN).

Vamos definir o conjunto de pontos viáveis para o problema (3.1) e solução não degenerada.

**Definição 3.2.** Seja  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ . Chamaremos de conjunto de pontos viáveis do problema de complementaridade dado por  $F$  o seguinte conjunto:

$$\Omega := \{x \in \mathbb{R}^n / x \geq 0, F(x) \geq 0\}. \tag{3.2}$$

**Definição 3.3.** Se  $x \in \Omega$  e verifica as seguintes condições  $x > 0$  e  $F(x) > 0$ , então diremos que este ponto é estritamente viável para o problema de complementaridade. E denotaremos o conjunto dos pontos estritamente viáveis por  $\Omega^0$ .

**Definição 3.4.** Uma solução de (3.1) é dita solução degenerada se para algum índice  $i$ ,  $x_i = 0$  e  $F_i(x) = 0$ .

**Definição 3.5.** Uma solução de (3.1) é dita solução não degenerada se para todo índice  $i$ ,  $x_i + F_i(x) \neq 0$ .

## 3.2 ALGORITMO DE PONTO INTERIOR VIÁVEL PARA NCP

Nesta seção apresentaremos um algoritmo de ponto interior para o problema de complementaridade (3.1). Este algoritmo gera uma sequência de pontos que satisfaz as desigualdades do problema de complementaridade (3.1). A idéia do algoritmo é resolver

dentro da região  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  o seguinte sistema de equações:

$$H(x) = x \bullet F(x) = \begin{pmatrix} x_1 F_1(x) \\ x_2 F_2(x) \\ \vdots \\ x_n F_n(x) \end{pmatrix} = 0. \quad (3.3)$$

Para esta finalidade, utilizaremos o método de Newton para construir uma sequência de “ pontos viáveis ”, a qual convergirá para a solução do problema de complementaridade (3.1).

É claro que toda solução do problema de complementaridade (3.1) é solução do sistema de equações (3.3) mas não podemos afirmar o contrário. Por outro lado, se restringirmos a solução do sistema (3.3) na região de pontos viáveis  $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n / x \geq 0 \text{ e } F(x) \geq 0\}$  podemos afirmar que uma solução deste sistema em  $\Omega$  é uma solução do problema de complementaridade (3.1). Assim, temos que desenvolver um algoritmo que gere uma sequência de pontos em  $\Omega$  e que converge para a solução do sistema (3.3), e portanto convergirá para uma solução do problema de complementaridade (3.1).

Para gerar esta sequência utilizaremos uma iteração de Newton no sistema (3.3) mas veremos que isso não será suficiente para garantir que a sequência gerada está contida em  $\Omega$ . Antes de começarmos a construção do algoritmo veremos algumas notações que auxiliarão no decorrer do texto.

O gradiente de  $H(x)$  em (3.3) é dado por:

$$\nabla H(x) = D_{F(x)} + D_x \nabla F(x), \quad (3.4)$$

onde  $D_{F(x)}$  e  $D_x$  são matrizes diagonais:

$$[D_{F(x)}]_{(i,i)} = F_i(x), \quad [D_x]_{(i,i)} = x_i \quad \text{para todo } i = 1, 2, \dots, n;$$

e a matriz jacobiana de  $F(x)$  é:

$$\nabla F(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1(x)}{x_1} & \frac{\partial F_1(x)}{x_2} & \dots & \frac{\partial F_1(x)}{x_n} \\ \frac{\partial F_2(x)}{x_1} & \frac{\partial F_2(x)}{x_2} & \dots & \frac{\partial F_2(x)}{x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F_n(x)}{x_1} & \frac{\partial F_n(x)}{x_2} & \dots & \frac{\partial F_n(x)}{x_n} \end{pmatrix}.$$

Observar que a  $i$ -ésima linha de  $\nabla H(x)$  é definida por:

$$\nabla H_i(x) = F_i(x)e_i + x_i \nabla F_i(x), \quad (3.5)$$

onde  $e_i$  é um vetor linha com 1 na  $i$ -ésima coordenada e  $\nabla F(x)$  é um vetor linha.

Portanto, dado um ponto  $x^k$  em  $\Omega$  que não seja solução de (3.3), pela iteração de Newton em  $H(x) = 0$  temos:

$$\nabla H(x^k)d_1^k = -H(x^k). \quad (3.6)$$

Supondo que  $\nabla H(x^k)$  é não singular, então o sistema (3.6) está bem definido em  $x^k$ . Então, se para algum índice  $i \in \{1, 2, \dots, n\}$  ocorrer  $H(x^k) = 0$  sem que seja solução de (3.1), teremos a seguinte situação:

Seja a  $i$ -ésima linha do sistema (3.6) onde ocorre  $H_i(x^k) = 0$ , isto é:

$$(F_i(x^k)e_i + x_i^k \nabla F_i(x^k))d_1^k = 0,$$

e pela não singularidade da matriz  $\nabla H(x^k)$  temos duas possibilidades:

1.  $x_i^k = 0$  e  $F_i(x^k) > 0$ , isso implica que  $d_1^k$  é tangente a restrição  $x_i \geq 0$ .
2.  $F_i(x^k) = 0$  e  $x_i^k > 0$ , isso implica que  $d_1^k$  é tangente a restrição  $F_i(x) \geq 0$ .

E em ambos os casos não temos garantido a viabilidade da direção  $d_1^k$  em  $\Omega$ .

A proposição abaixo nos fornece as condições para que uma direção  $d \in \mathbb{R}^n$  tem que satisfazer para ser uma direção viável em  $\Omega$ .

**Proposição 3.6.** Seja  $d \in \mathbb{R}^n$  e  $x \in \Omega$ . Se a direção  $d$  satisfaz as condições:

1.  $d_i > 0$  para todo índice  $i$  tal que  $x_i = 0$ .
2.  $\nabla F_i(x)d > 0$  para todo índice  $i$  tal que  $F_i(x) = 0$ . então  $d$  é uma direção viável no ponto  $x$ .

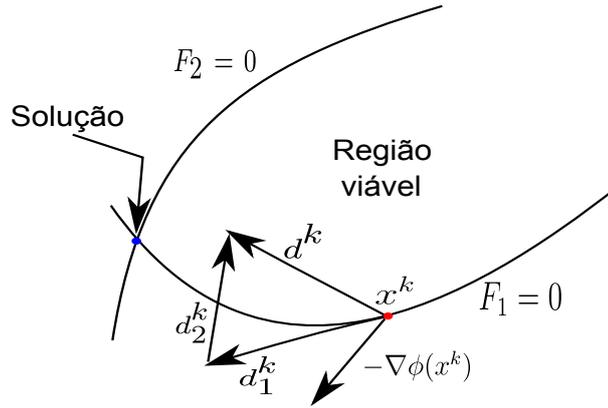
Portanto, usaremos uma direção de restauração, para compor junto com a direção  $d_1$  de Newton uma nova direção  $d$  que seja viável em  $\Omega$ . Para isso tome o seguinte sistema:

$$\nabla H(x^k)d_2^k = \rho^k E, \quad (3.7)$$

onde o vetor  $E \in \mathbb{R}^n$  é composto por 1's e um parâmetro  $\rho^k > 0$ . Então para todo ponto  $x^k \in \Omega$  que não seja solução de (3.1) mas que para algum índice  $i$  temos que  $H_i(x^k) = 0$  segue que:

1.  $x_i = 0$  e  $F_i(x^k) > 0$  isso implica que  $d_2^k > 0$ .
2.  $F_i(x^k) = 0$  e  $x_i^k = 0$  isso implica que  $\nabla F_i(x^k)d_2^k > 0$ .

Assim a direção  $d_2^k$  é uma direção de restauração para  $\Omega$  pela Proposição 3.6. Portanto, a seguinte combinação linear  $d = d_1^k + d_2^k$ , com  $\rho_k > 0$  faz com que a direção  $d^k$  seja uma direção viável em  $\Omega$  como podemos ver na Figura 3.1.



**Figura 3.1:** Representação das direções

Vamos definir  $\rho^k = \rho_0 \frac{\phi(x^k)^\beta}{n}$  onde  $\rho_0 > 0$ ,  $\phi(x^k) = (x^k)^T F(x^k)$  e  $\beta \in [1, 2]$ . Observe que  $\rho^k > 0$  para todo  $x^k \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$  que não seja solução do problema de complementaridade. Desta forma vamos calcular a direção de busca  $d^k$  resolvendo o seguinte sistema:

$$\nabla H(x^k)d^k = -H(x^k) + \rho^k E, \quad (3.8)$$

em cada iteração. Veremos agora que a direção  $d^k$  tem a propriedade de ser viável em  $\Omega$  e de ser uma direção de descida para a seguinte função potencial:

$$\phi(x) = x^T F(x). \quad (3.9)$$

**Proposição 3.7** (Viabilidade da direção). Sejam  $x^k \in \Omega$  tal que  $\phi(x^k) > 0$  e  $\nabla H(x^k)$  seja não singular, então temos que a direção  $d^k$  obtida pela resolução do sistema (3.8) é viável em  $\Omega$ .

**Proposição 3.8** (Direção de descida). Em todo ponto  $x^k \in \Omega$  tal que  $\phi(x^k) > 0$ , a direção  $d^k$  obtida pela resolução do sistema (3.8) é uma direção de descida para  $\phi(x^k)$  se  $\rho_0 \phi(x^k)^{\beta-1} < 1$ .

Da Proposição 3.7 e da Proposição 3.8 temos que a direção  $d^k$  solução do sistema (3.8)

é viável e de descida para o problema de complementaridade (3.1) desde que tenhamos  $\nabla H(x^k)$  não singular e  $\rho_0 \phi(x^k)^{\beta-1} < 1$  para todo  $x^k \in \Omega$ .

### 3.3 DESCRIÇÃO DO ALGORITMO FDA–NCP

O presente algoritmo produzirá uma sequência de pontos interiores a região  $\Omega$  que converge a uma solução do problema de complementaridade mediante a resolução de um sistema linear e uma busca linear nas restrições  $x \geq 0$ ,  $F(x) \geq 0$  e na função potencial  $\phi(x)$ . A busca que iremos utilizar é a de Armijo. Vamos considerar os seguintes parâmetros:

**Algoritmo 2** (Algoritmo FDA–NCP).

**Passo 1** Dados de entrada:  $c, \epsilon > 0$ ,  $\rho_0, \eta, \nu \in (0, 1)$ ,  $\beta \in (1, 2]$ .

Dados iniciais:  $x^0 \in \Omega$  estritamente viável tal que  $\phi(x^0) \leq c$  e  $k = 0$ .

**Passo 2** Direção de busca.

Resolva o sistema

$$[\text{diag}(F(x^k)) + \text{diag}(x^k)\nabla F(x^k)] d^k = -x^k \bullet F(x^k) + \rho^k E,$$

$$\text{onde } \rho^k = \rho^0 \left[ \frac{\phi^{(\beta)}(x^k)}{n} \right].$$

**Passo 3** Busca linear. Define-se o tamanho do passo  $t^k$  como sendo o primeiro valor da sequência  $\{1, \nu, \nu^2, \dots\}$  satisfazendo:

$$(a) \quad x^k + t^k d^k \geq 0,$$

$$(b) \quad F(x^k + t^k d^k) \geq 0,$$

$$(c) \quad \phi(x^k) + t^k \eta \nabla \phi(x^k) \bullet d^k \geq \phi(x^k + t^k d^k).$$

**Passo 4** Atualização dos dados:

$$x^{k+1} := x^k + t^k d^k, \quad \text{e,} \quad k := k + 1.$$

**Passo 5** Critério de parada:

Se  $\phi(x^{k+1}) < \epsilon$ , então PARAR.

Caso contrário volta ao passo 1.

Neste algoritmo podemos destacar dois pontos importantes. Primeiro é o cálculo da direção de busca e o segundo é a busca linear. No Passo 1 determinamos a direção de busca  $d^k$  por meio da resolução de um sistema linear. Este sistema fornece uma direção  $d^k$  que é uma combinação da direção de Newton  $d_1^k$  e da direção de restauração  $d_2^k$ , logo  $d^k$  tem a propriedade de ser uma direção de descida da função potencial  $\phi(x^k)$  e viável na região  $\Omega$  segundo a Proposição 3.7 e Proposição 3.8, que foram mostrados em [24] e na qual podem-se encontrar outros modos mais aprofundados de como resolver o problema de complementaridade (3.1).

### 3.4 CONVERGÊNCIA GLOBAL DO FDA–NCP

Nesta seção apresentamos resultados teóricos sobre a convergência global do algoritmo FDA–NCP a uma solução do problema de complementaridade (3.1).

Mostraremos que o algoritmo FDA–NCP gera uma sequência de pontos  $\{x^k\} \subset \Omega$  a partir de um ponto estritamente viável, e a cada iteração tem-se que o valor da função potencial  $\phi(x^k)$  vai diminuindo. Para tal, o algoritmo produzirá uma direção de busca  $d^k$  que tem as propriedades de ser uma direção viável em  $\Omega$  e de descida para a função potencial  $\phi(x)$ .

Assumiremos condições clássicas para a função  $F(x)$ , a matriz  $\nabla H(x)$  e o conjunto de pontos viáveis  $\Omega$ .

**Suposição 3.9.** O conjunto

$$\Omega_c \equiv \{x \in \Omega / \phi(x) \leq c\},$$

é compacto e possui interior  $\Omega_c^0 \neq \emptyset$ , tal que para cada  $x \in \Omega_c^0$  satisfaz  $x > 0$  e  $F(x) > 0$  e além disso podemos escolher  $\rho_0 = \frac{\alpha}{c^{\beta-1}}$  com  $\alpha \in (0, 1)$ .

**Suposição 3.10.** A função  $F(x)$  é continuamente diferenciável e  $\nabla F(x)$  satisfaz a condição de Lipschitz:

$$\|\nabla F(y) - \nabla F(x)\| \leq \gamma \|y - x\|,$$

para qualquer  $x, y \in \Omega_c$ , onde  $\gamma_0$  é uma constante positiva.

**Suposição 3.11.** A matriz  $\nabla H(x)$  é não singular para todo  $x \in \Omega_c$ , ou seja, existe  $(\nabla H(x))^{-1}$  para todo  $x \in \Omega_c$ , onde  $H(x)$  é dado por

$$H(x) = \begin{pmatrix} x_1 F_1(x) \\ \vdots \\ x_n F_n(x) \end{pmatrix}.$$

A suposição 3.9 garante a existência de pontos estritamente viáveis em  $\Omega_c$ . Da suposição 3.11 temos que as componentes de  $x$  e  $F(x)$  não se anulam simultaneamente para nenhum  $x \in \Omega_c$ . Temos também que o sistema de equações do algoritmo

$$\nabla H(x^k)d^k = -H(x^k) + \rho^k E,$$

possui solução única, logo a direção  $d^k$  está bem definida.

Como  $\nabla F(x)$  é contínua, segue que tanto  $\nabla H(x)$  quanto  $(\nabla H(x))^{-1}$  são aplicações contínuas e limitadas em  $\Omega_c$ . Ou seja, existem constantes positivas  $\kappa_0$  e  $\kappa$  tal que  $\|\nabla H(x)\| \leq \kappa_0$  e  $\|(\nabla H(x))^{-1}\| \leq \kappa$  para todo  $x \in \Omega_c$ .

Em [24] mostram-se os seguintes resultados que provam que a direção de busca gerada pelo algoritmo FDA–NCP é: limitada, direção de descida e constitui um campo uniforme de direções viáveis.

**Lema 3.12.** A direção de busca  $d^k$  é uma direção de descida para  $\phi(x^k)$  para qualquer  $x^k \in \Omega_c$  tal que  $H(x^k) \neq 0$ .

**Lema 3.13.** A sequência  $d^k$  gerada pelo algoritmo FDA–NCP, consiste em um campo uniforme de direções viáveis do problema de complementaridade em  $\Omega$ .

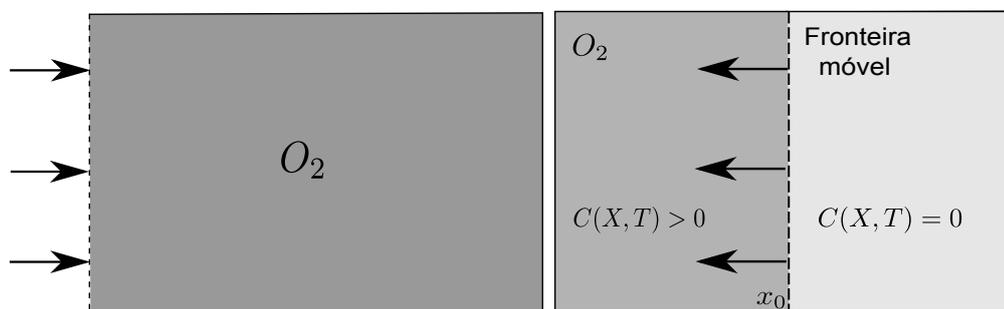
Agora, podemos enunciar o teorema que garante a convergência global do algoritmo a uma solução do problema de complementaridade.

**Teorema 3.14.** Dado um ponto inicial estritamente viável,  $x^0 \in \Omega_c$ , existe uma subsequência de  $\{x^k\}$  gerada pelo Algoritmo FDA–NCP que converge para  $x^*$ , solução do problema de complementaridade (3.1).

# 4 DIFUSÃO DO OXIGÊNIO NUM TECIDO

## 4.1 MODELAGEM DO PROBLEMA FÍSICO

O problema de difusão de oxigênio aparece em muitas aplicações como no tratamento do câncer, onde as células cancerígenas absorvem uma maior quantidade de oxigênio em relação as células normais [4]. A presença de oxigênio favorece a absorção da radiação no tecido, então, uma primeira fase do problema consiste em injetar oxigênio até que o tecido atinja sua maior concentração possível (estado estacionário), isto é, não existe transferência de oxigênio dentro do tecido, como na Figura 4.1a. Aqui nós estudamos um caso particular unidimensional envolvendo difusão de oxigênio que possui uma fronteira móvel. Por simplicidade é permitido o oxigênio difundir-se dentro de um meio o qual absorve e imobiliza oxigênio a razão constante. A concentração de oxigênio na superfície do meio é mantida constante e a fronteira móvel indica o limite de penetração do oxigênio, [10].



(a) Injeção de oxigênio até o estado estacionário (b) Descrição da fronteira móvel

**Figura 4.1:** Esquema da difusão do oxigênio num tecido. A primeira etapa é representada na esquerda, o oxigênio ingressa até atingir o equilíbrio. Na segunda fase, à direita, o tecido é isolado e o oxigênio começa a difundir-se e é absorvido pelo meio gerando a fronteira móvel.

Na segunda fase, a superfície do meio é selada de modo que não passa mais oxigênio dentro ou fora. O meio continua absorvendo o oxigênio disponível presente nele e, como consequência, a fronteira limitada pelo estado estacionário começa a retroceder até a superfície selada, como na Figura 4.1b. O maior problema é determinar a posição da fronteira e a distribuição do oxigênio como função do tempo. Um segundo problema é associado com as técnicas numéricas que tratam as descontinuidades na derivada das condições de fronteira, os quais resultam na vedação abrupta da superfície exterior, [13].

Denotamos por  $C(X, T)$  a concentração do oxigênio livre a ser difundido a uma distância  $X$  da superfície do meio no instante de tempo  $T$ .  $D$  é uma constante de difusão,  $r$  é a razão de consumo de oxigênio pela unidade de volume do meio (é assumido constante para  $C(X, T) > 0$ ). O estado estacionário é definido pela solução de:

$$D \frac{d^2 C}{dX^2} - r = 0, \quad (4.1)$$

onde  $C$  satisfaz as condições:

$$C = \frac{\partial C}{\partial X} = 0, \quad \text{para } X_0 \leq X,$$

onde  $X_0$  corresponde à penetração do oxigênio mais estendida, e na superfície exterior  $C = C_0 = \text{constante}$ , para  $X = 0$ . A solução procurada é facilmente calculada, isto é:

$$C = \frac{r}{2D}(X - X_0)^2, \quad X_0 = \sqrt{\frac{2DC_0}{r}}. \quad (4.2)$$

Depois que a superfície em  $X = 0$  foi selada, a posição do retrocesso da fronteira é denotada por  $X_0(T)$  e o problema a ser resolvido torna-se:

$$\frac{\partial C}{\partial T} = D \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} - r, \quad 0 \leq X \leq X_0, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial X} = 0, \quad X = 0, T \geq 0, \quad (4.4)$$

$$C = \frac{\partial C}{\partial X} = 0, \quad X = X_0(T), T \geq 0, \quad (4.5)$$

$$C = \frac{r}{2D}(X - X_0)^2, \quad 0 \leq X \leq X_0, T = 0, \quad (4.6)$$

onde  $T = 0$  é o momento quando a superfície é selada. Fazendo a mudança de variáveis:

$$x = \frac{X}{X_0}, \quad t = \frac{D}{X_0^2} T, \quad c = \frac{C}{2C_0}, \quad (4.7)$$

e denotando por  $s(t)$  o valor de  $x$  correspondente a  $X_0(T)$ , o sistema acima é reduzido a

seguinte forma não dimensional:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 1, \quad 0 \leq x \leq s(t), \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad x = 0, t \geq 0, \quad (4.9)$$

$$c = \frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad x = s(t), t \geq 0, \quad (4.10)$$

$$c = \frac{1}{2}(1 - x)^2, \quad 0 \leq x \leq 1, t = 0, \quad (4.11)$$

onde  $c$  é a concentração do oxigênio.

Em [2], o sistema (4.8)-(4.11) é transformado num problema variacional, dado por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + 1 \geq 0, \quad c \geq 0, \quad (4.12)$$

junto a igualdade:

$$\left( \frac{\partial c}{\partial t} - \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + 1 \right) c = 0. \quad (4.13)$$

A desigualdade (4.12) é satisfeita pela igualdade em (4.8) dentro da região  $0 < x < s(t)$ . Quando  $s(t) \leq x \leq 1$ , por (4.10) temos que  $c = 0$  e assim (4.12) é equivalente à  $1 > 0$ . A desigualdade  $c \geq 0$  se segue de (4.11). A igualdade (4.13) é válida porque para qualquer  $x \in [0, 1]$  onde um dos fatores se anula.

## 4.2 DESCRIÇÃO DOS ESQUEMAS NUMÉRICOS

Nesta seção descreveremos com detalhe o esquema de diferenças finitas para o modelo de Difusão de Oxigênio num tecido para os métodos de FDA–NCP e de Crank–Nicolson, para isto utilizaremos a malha descrita no Capítulo 2 e ter em conta que nos pontos da fronteira  $x_0$  e  $x_M$  temos as seguintes condições:

$$\frac{\partial c}{\partial x}(x_0, t) = \frac{\partial c}{\partial x}(x_M, t) = 0.$$

Quando trabalhamos com condições de fronteira tipo Neumann, para esses pontos  $x_0$  e  $x_M$  empregamos pontos fantasmas  $x_{-1}$  e  $x_{M+1}$  como mostra a Figura 4.2.



**Figura 4.2:** Discretização Espacial pelo método de Ghost Point

Aproximando as condições de fronteira com derivadas em diferença central, tem-se:

$$\frac{\partial c}{\partial x}(x_0, t) = \frac{c_1 - c_{-1}}{2h} = 0 \quad \Rightarrow c_{-1} = c_1, \quad (4.14)$$

e

$$\frac{\partial c}{\partial x}(x_M, t) = \frac{c_{M+1} - c_{M-1}}{2h} = 0 \quad \Rightarrow c_{M-1} = c_{M+1}. \quad (4.15)$$

### 4.2.1 Aplicando FDA-NCP

Para aplicar o algoritmo de complementaridade FDA-NCP, das relações (4.12) e (4.13) reconhecemos nosso operador discreto como  $F(c^{n+1})$ , sendo:

$$F(c^{n+1}) = \frac{c_m^{n+1} - c_m^n}{\Delta t} - \frac{c_{m-1}^{n+1} - 2c_m^{n+1} + c_{m+1}^{n+1}}{2\Delta x^2} - \frac{c_{m-1}^n - 2c_m^n + c_{m+1}^n}{2\Delta x^2} + 1, \quad (4.16)$$

já que no tempo  $t_n$  conhecemos a solução. Substituindo (4.16) na equação (4.12) obtemos:

$$-\mu c_{m-1}^{n+1} + (2 + 2\mu)c_m^{n+1} - \mu c_{m+1}^{n+1} \geq \mu c_{m-1}^n + (2 - 2\mu)c_m^n + \mu c_{m+1}^n - 2k. \quad (4.17)$$

onde  $k = \Delta t$ ,  $h = \Delta x$  e  $\mu = \frac{k}{h^2}$ . A expressão (4.17) é válida para todo  $m = 0, \dots, M$ .

Nos pontos de fronteira  $x_0$  e  $x_m$  temos que:

Para  $m = 0$ , substituímos (4.14) em (4.17):

$$2(1 + \mu)c_0^{n+1} - 2\mu c_1^{n+1} \geq 2(1 - \mu)c_0^n + 2\mu c_1^n - 2k. \quad (4.18)$$

Para  $m = M$ , substituímos (4.15) em (4.17):

$$-2\mu c_{M-1}^{n+1} + 2(1 + \mu)c_M^{n+1} \geq 2\mu c_{M-1}^n + 2(1 - \mu)c_M^n - 2k. \quad (4.19)$$

Então, juntando as expressões (4.17) válido para  $m = 1, 2, \dots, M - 1$ ; (4.18) e (4.19) obtemos o seguinte sistema matricial:

$$F(C^{n+1}) = AC^{n+1} - BC^n + 2K \geq 0, \quad (4.20)$$

onde os vetores:  $K = (k, k, \dots, k)^t$ ,  $C^{n+1} = (c_0^{n+1}, c_1^{n+1}, \dots, c_M^{n+1})^t \in \mathbb{R}^{M+1}$  e as matrizes

$A, B \in \mathbb{R}^{(M+1) \times (M+1)}$  são dadas por:

$$A = \begin{pmatrix} 2(1+\mu) & -2\mu & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -\mu & 2(1+\mu) & -\mu & 0 & 0 & & & & 0 \\ 0 & -\mu & 2(1+\mu) & -\mu & 0 & & & & 0 \\ 0 & 0 & -\mu & 2(1+\mu) & -\mu & & & & 0 \\ 0 & & & & & & & & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & & & & & & & 0 \\ 0 & & & & & & -\mu & 2(1+\mu) & -\mu \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -2\mu & 2(1+\mu) \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

$$B = \begin{pmatrix} 2(1-\mu) & 2\mu & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \mu & 2(1-\mu) & \mu & 0 & 0 & & & & 0 \\ 0 & \mu & 2(1-\mu) & \mu & 0 & & & & 0 \\ 0 & 0 & \mu & 2(1-\mu) & \mu & & & & 0 \\ 0 & & & & & & & & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & & & & & & & 0 \\ 0 & & & & & & \mu & 2(1-\mu) & \mu \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -2\mu & 2(1+\mu) \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

Agora, das equações (4.12), (4.13) temos que:

$$C^{n+1} \geq 0 \quad \text{e} \quad F(C^{n+1}) \bullet C^{n+1} = 0,$$

que juntas à equação (4.20) formam um Problema de Complementaridade que pode ser resolvido pelo algoritmo FDA-NCP desenvolvido no Capítulo 3.

O Algoritmo 3 descreve brevemente o método FDA-NCP e será implementado no Matlab, os resultados obtidos serão mostrados na Seção 4.2.3.

**Algoritmo 3** (Implementação FDA-NCP).

**Passo 1** Fazer  $n = 0$  e  $N = 1/\Delta t$ .

**Passo 2** Para obter a concentração  $C^{n+1}$  aplicamos o método FDA-NCP descrito no

Algoritmo 2 para resolver o problema de complementaridade:

$$F(C^{n+1}) \bullet C^{n+1} = 0, \quad C^{n+1} \geq 0 \quad \text{e} \quad F(C^{n+1}) = AC^{n+1} - BC^n + 2K \geq 0,$$

onde as matrizes  $A$ ,  $B$  e o vetor  $K$  são dadas em (4.20), (4.21) e (4.22).

**Passo 3** Se  $n = N$  então **FIM**. Senão  $n \leftarrow n + 1$  e voltar ao Passo 2.

## 4.2.2 Aplicando Crank-Nicolson

Nesta seção empregaremos o método de Crank–Nicolson para achar a solução aproximada da equação (4.8) junto a suas condições de fronteira (4.9), (4.10) e condição inicial (4.11).

Portanto, expressamos a equação (4.8) em sua forma discreta, isto é:

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} = \frac{c_{m+1}^{n+1} - 2c_m^{n+1} + c_{m-1}^{n+1}}{2h^2} + \frac{c_{m+1}^n - 2c_m^n + c_{m-1}^n}{2h^2}. \quad (4.23)$$

Multiplicando a equação (4.23) pelo fator “  $2k$  ” e fazendo  $\mu = \frac{k}{h^2}$  obtemos:

$$-\mu c_{m-1}^{n+1} + (2 + 2\mu)c_m^{n+1} - \mu c_{m+1}^{n+1} = \mu c_{m-1}^n + (2 - 2\mu)c_m^n + \mu c_{m+1}^n - 2k. \quad (4.24)$$

A equação (4.24) é válida para todo  $m = 0, 1, \dots, M$ . Nos pontos de fronteira temos que: Para  $m = 0$  substituímos (4.14) em (4.24) e obtemos:

$$(2 + 2\mu)c_0^{n+1} - 2\mu c_1^{n+1} = (2 - 2\mu)c_0^n + 2\mu c_1^n - 2k, \quad (4.25)$$

de modo análogo para o ponto de fronteira  $x_M$ , de (4.15) em (4.24) temos:

$$-2\mu c_{M-1}^{n+1} + (2 + 2\mu)c_M^{n+1} = 2\mu c_{M-1}^n + (2 - 2\mu)c_M^n - 2k. \quad (4.26)$$

A partir de (4.24) para todo  $m = 1, 2, \dots, M - 1$ , junto a (4.25) e (4.26) obtemos o seguinte sistema matricial na variável  $C^{n+1}$ :

$$AC^{n+1} = BC^n - 2K, \quad (4.27)$$

sendo  $A, B \in \mathbb{R}^{(M+1) \times (M+1)}$  como em (4.21), (4.22) e os vetores colunas  $C^n, K \in \mathbb{R}^{M+1}$

são dados por:

$$C^n = \begin{pmatrix} c_0^n \\ c_1^n \\ \vdots \\ c_M^n \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad K = \begin{pmatrix} k \\ k \\ \vdots \\ k \end{pmatrix},$$

onde em (4.27) o vetor variável  $C^{n+1}$  no tempo “  $n + 1$  ” é obtido a partir do tempo “  $n$  ” no valor conhecido  $C^n$ .

A continuação passamos a descrever o algoritmo do método de Crank–Nicolson.

**Algoritmo 4** (Implementação Crank–Nicolson).

**Passo 1** Fazer  $n = 0$  e  $N = 1/\Delta t$ .

**Passo 2** Resolvemos o sistema linear em cada passo de tempo “  $n$  ”:

$$AC^{n+1} = BC^n - 2K,$$

onde as matrizes  $A$ ,  $B$  e o vetor  $K$  são dadas em (4.20), (4.21) e (4.22).

Neste passo obtemos o valor da concentração  $C^{n+1}$ .

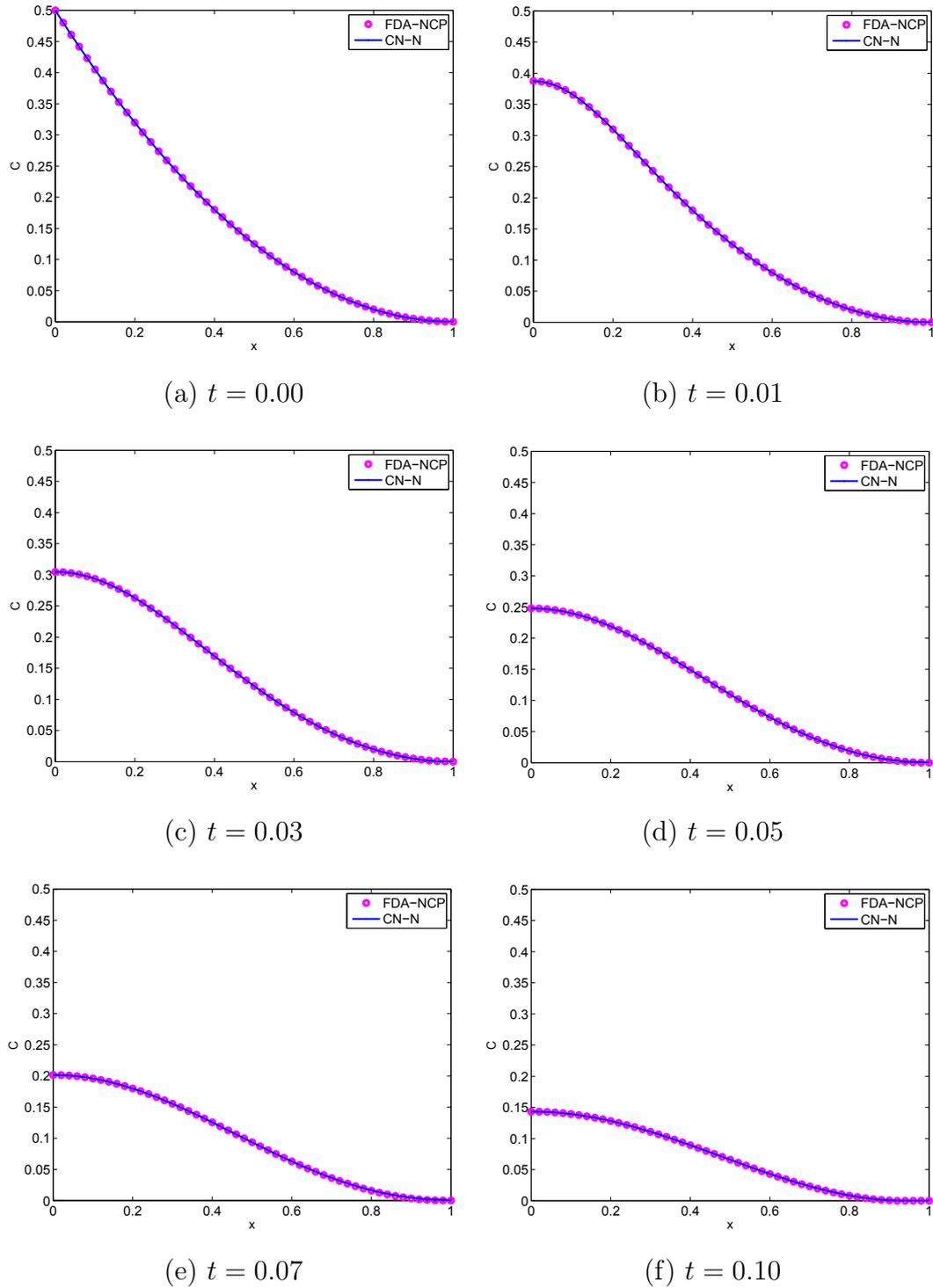
**Passo 3** Se  $n = N$  então **FIM**. Senão  $n \leftarrow n + 1$  e voltar ao Passo 2.

Os resultados obtidos da implementação do Algoritmo 4 no Matlab serão mostrados na Seção 4.2.3.

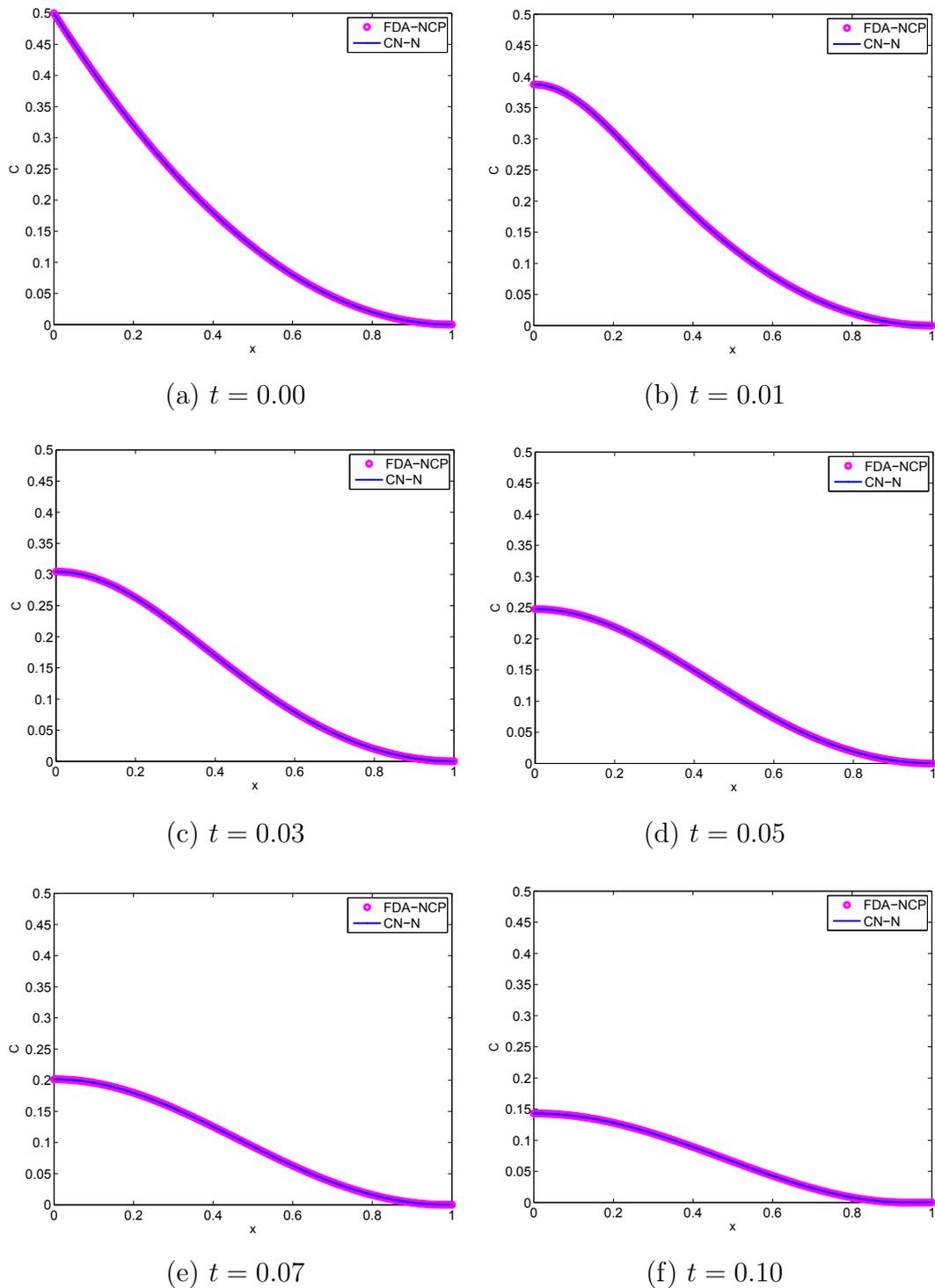
### 4.2.3 Comparação dos Métodos FDA–NCP com Crank–Nicolson

Nesta seção apresentamos os resultados numéricos das simulações feitas no Matlab, para o qual consideramos  $[x_0, x_M] = [0, 1]$  e  $[t_0, t_N] = [0, 1]$  como os intervalos para o espaço e tempo respectivamente. Vamos manter  $\Delta t = k = 10^{-5}$  constante e  $\Delta x = 1/M$  onde  $M$  é o número de subintervalos no espaço e tomará os seguintes valores: 50, 100, 200, 400 e 800. A tolerância de erro no algoritmo FDA–NCP é  $10^{-8}$ .

Considerando estes dados de entrada no Algoritmo 3 e no Algoritmo 4 obtemos os resultados mostrados nas Figuras 4.3 e 4.4. Observe que os dois métodos coincidem para os instantes de tempo “  $t$  ” indicados.



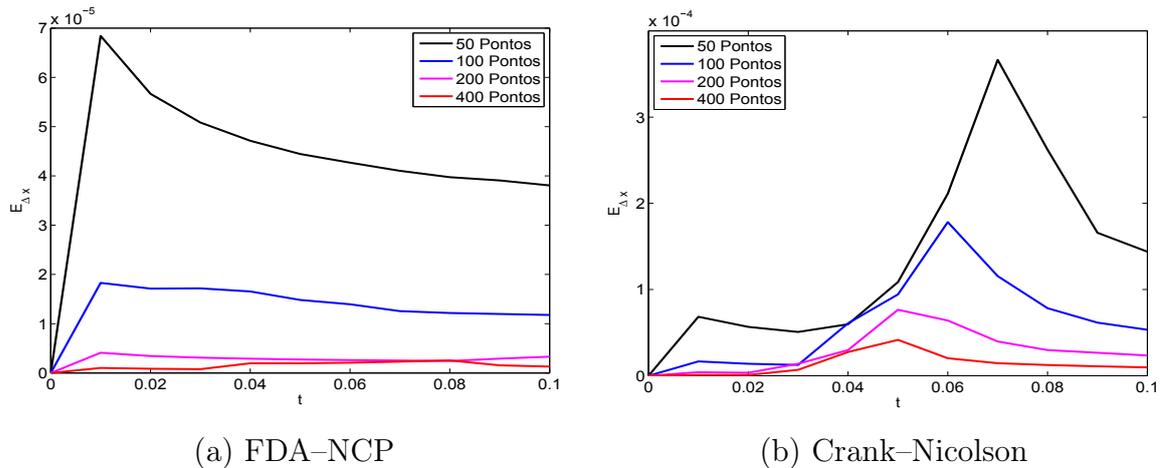
**Figura 4.3:** Comparação dos métodos de Crank–Nicolson com FDA–NCP para  $M = 50$  para os instantes de tempo “ $t$ ” indicados. O valor da concentração  $C$  obtido pelo FDA–NCP está representado por bolinhas rosas. O valor de  $C$  obtido pelo Crank–Nicolson é representado pela linha contínua azul.



**Figura 4.4:** Comparação dos métodos de Crank–Nicolson com FDA–NCP para  $M = 200$  para os instantes de tempo “ $t$ ” indicados. O valor da concentração  $C$  obtido pelo FDA–NCP está representado por bolinhas rosas. O valor de  $C$  obtido pelo Crank–Nicolson é representado pela linha contínua azul.

#### 4.2.4 Análise de Erro

Nesta seção faremos a análise de erro para os métodos FDA–NCP e Crank–Nicolson com Newton nos baseando no Erro Relativo segundo a Tabela 2.1 obtida na Seção 2.2 e considerando a norma (2.7) para cada instante de tempo. O comprimento do intervalo em tempo será constante e igual a  $\Delta t = k = 10^{-5}$ ,  $\Delta x = h, \frac{h}{2}, \frac{h}{4}$  e  $\frac{h}{8}$ . Com  $h = \frac{1}{50}$  obtemos os resultados das Tabelas 4.1 e 4.2 os quais são representadas na Figura 4.5.



**Figura 4.5:** Tempo( $t$ ) vs  $E_{\Delta x}$ . Erro Relativo na Difusão de Oxigênio num tecido obtidas das Tabelas 4.1 e 4.2 onde  $\Delta x = \frac{1}{50}, \frac{1}{100}, \frac{1}{200}$  e  $\frac{1}{400}$ .

**Tabela 4.1:** Erro Relativo do método FDA–NCP com  $h = 1/50$  e para os instantes de tempo “ $t$ ” indicados na primeira coluna.

$t$	$E_h$	$E_{h/2}$	$E_{h/4}$	$E_{h/8}$	$\frac{E_h}{E_{h/2}}$	$\frac{E_{h/2}}{E_{h/4}}$	$\frac{E_{h/4}}{E_{h/8}}$
0.01	0.00006841	0.00001828	0.00000411	0.00000102	3.74	4.45	4.03
0.02	0.00005666	0.00001712	0.00000344	0.00000086	3.31	4.98	4.00
0.03	0.00005085	0.00001718	0.00000310	0.00000077	2.96	5.54	4.03
0.04	0.00004712	0.00001654	0.00000288	0.00000196	2.85	5.74	1.47
0.05	0.00004444	0.00001482	0.00000273	0.00000197	3.00	5.43	1.39
0.06	0.00004269	0.00001394	0.00000262	0.00000207	3.06	5.32	1.27
0.07	0.00004102	0.00001255	0.00000252	0.00000229	3.27	4.98	1.10
0.08	0.00003974	0.00001217	0.00000244	0.00000254	3.27	4.99	0.96
0.09	0.00003908	0.00001197	0.00000291	0.00000154	3.26	4.11	1.89
0.10	0.00003807	0.00001177	0.00000330	0.00000130	3.23	3.57	2.54

**Tabela 4.2:** Erro Relativo do método Crank–Nicolson com  $h = 1/50$  e para os instantes de tempo “ $t$ ” indicados na primeira coluna.

$t$	$E_h$	$E_{h/2}$	$E_{h/4}$	$E_{h/8}$	$\frac{E_h}{E_{h/2}}$	$\frac{E_{h/2}}{E_{h/4}}$	$\frac{E_{h/4}}{E_{h/8}}$
0.01	0.00006839	0.00001665	0.00000411	0.00000102	4.11	4.05	4.03
0.02	0.00005662	0.00001389	0.00000344	0.00000086	4.08	4.04	4.00
0.03	0.00005082	0.00001251	0.00001383	0.00000685	4.06	0.90	2.02
0.04	0.00005966	0.00006083	0.00002981	0.00002747	0.98	2.04	1.09
0.05	0.00010865	0.00009436	0.00007653	0.00004164	1.15	1.23	1.84
0.06	0.00021119	0.00017821	0.00006408	0.00002032	1.19	2.78	3.15
0.07	0.00036643	0.00011558	0.00003969	0.00001454	3.17	2.91	2.73
0.08	0.00026217	0.00007838	0.00002974	0.00001246	3.34	2.64	2.39
0.09	0.00016583	0.00006163	0.00002666	0.00001096	2.69	2.31	2.43
0.10	0.00014386	0.00005339	0.00002355	0.00000975	2.69	2.27	2.42

### 4.3 CONCLUSÕES PARCIAIS

Se resolve o problema (4.8) - (4.11) com um novo método, o qual é baseado em um esquema de diferenças finitas e um algoritmo de complementaridade.

Para simular a fase da difusão de oxigênio, começamos com a solução de equilíbrio (solução estacionária) e a partir dela obtemos a concentração de oxigênio através do tempo. Os resultados obtidos coincidem com os resultados apresentados em [13] e [11] como pode-se observar nas Figuras 4.3 e 4.4.

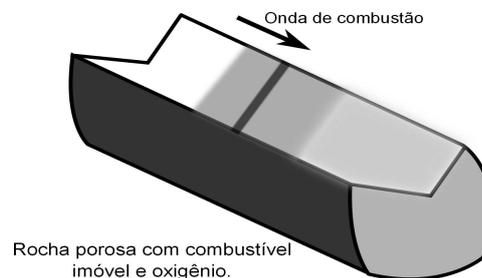
A Tabela 4.1 mostra uma maior redução do erro para o método FDA–NCP em relação a Tabela (4.2) para o método de Crank–Nicolson. O quociente  $E_{\Delta x}/E_{\Delta x/2}$ , ( $\Delta x = h, h/2, h/4$ ) é maior para o FDA–NCP segundo mostra a Tabela 4.1 em relação à Tabela 4.2 para o método de Crank–Nicolson.

A análise de erro na Figura 4.5 mostra uma grande variação do erro quando consideramos 50 pontos na discretização do eixo  $x$ . Isto é devido aos poucos pontos considerados. Porém, a análise mostra uma diminuição cada vez maior quando consideramos mais pontos na discretização do eixo  $x$  para os métodos FDA–NCP e Crank–Nicolson com Newton.

## 5 *MODELO SIMPLES DE COMBUSTÃO DE OXIGÊNIO IN-SITU*

### 5.1 MODELAGEM DO PROBLEMA FÍSICO

Neste modelo nós estudamos fluxos unidimensionais possuindo uma onda de combustão no caso quando o oxidante (ar com oxigênio) é injetado num meio poroso, Figura 5.1.



**Figura 5.1:** Combustão de oxigênio in-situ

O meio contém inicialmente um combustível que é essencialmente imóvel, não vaporiza e a quantidade de oxigênio é ilimitada. Este é o caso para combustíveis sólidos ou para combustíveis líquidos com baixas saturações de modo que não podem se mexer. Neste trabalho estudamos brevemente um modelo simplificado, no qual supomos que somente uma parte pequena do espaço disponível é ocupado pelo combustível, de modo que as mudanças de porosidade na reação são desprezíveis. Supomos que a temperatura do sólido e do gas são a mesma (equilíbrio térmico local) e a velocidade do gas é constante. A perda de calor é desprezível, o que é razoável para combustão in situ em condições de campo. Também admitimos que as variações de pressão são pequenas em comparação com a pressão prevalecente.

O modelo com coordenada temporal “  $t$  ” e coordenada espacial “  $x$  ” inclui a equação

de equilíbrio do calor (5.1), a equação de equilíbrio molar para combustíveis imóveis (5.2) e a lei dos gases ideais (5.3):

$$C_m \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(c_g \rho u (T - T_{res}))}{\partial x} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Q_r W_r, \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} = -\mu_f W_r, \quad (5.2)$$

$$\rho = \frac{P}{T R}. \quad (5.3)$$

Aqui  $T [K]$  é a temperatura,  $\rho [mol/m^3]$  é a densidade molar do gás,  $\rho_f [mol/m^3]$  é a concentração molar do combustível imóvel. O conjunto de parâmetros juntos a seus valores típicos são dados na Tabela 5.1.

**Tabela 5.1:** Parâmetros dimensionais para combustão in situ e seus valores típicos

Símbolo	Quantidade Física	Valor	Unidade
$T_{res}$	Temperatura do reservatório inicial.	273	[K]
$C_m$	Capacidade calorífica do meio poroso.	$2 \cdot 10^6$	[J/m <sup>3</sup> K]
$c_g$	Capacidade calorífica do gás.	27.42	[J/mol K]
$\lambda$	Condutividade térmica do meio poroso.	0.87	[J/(m s K)]
$Q_r$	Entalpia do combustível imóvel em $T_{res}$ .	$4 \cdot 10^5$	[J/mol]
$E_r$	Energia de ativação.	58000	[J/mol]
$k_p$	Parâmetro pré-exponencial.	500	[1/s]
$R$	Constante ideal dos gases.	8.314	[J/(mol K)]
$P$	Pressão prevalecente (1 atm).	101325	[Pa]
$u_{inj}$	Velocidade de Darcy do gás injetado (200 m/dia).	$2.3 \cdot 10^{-3}$	[m/s]
$\rho_f^{res}$	Densidade molar inicial do combustível.	372	[mol/m <sup>3</sup> ]

Na reação de combustão,  $\mu_f$  moles de combustível imóvel reagem com  $\mu_0$  moles de oxigênio e geram  $\mu$  moles de produtos gasosos e, possivelmente, produtos sólidos não reativos. Por simplicidade consideramos o caso  $\mu_f = \mu_0 = \mu_g = 1$ , como por exemplo, na reação  $C + O_2 \rightarrow CO_2$ . Como estamos considerando que a quantidade de oxigênio é ilimitada, a razão da reação  $W_r$  será tomada como:

$$W_r = k_p \rho_f \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right), \quad (5.4)$$

onde os valores típicos de  $k_p$  e  $E_r$  são mostrados na Tabela 5.1. As variáveis a serem

encontradas são a temperatura  $T$  e a concentração molar do combustível imóvel  $\rho_f$ .

### 5.1.1 Equações Adimensionais

As equações não estão dimensionadas, mas introduzindo variáveis independentes e dependentes adimensionais (denotas por til) como razões das quantidades dimensionais e as quantidades referenciais (denotadas por estrelas):

$$\tilde{t} = \frac{t}{t^*}, \quad \tilde{x} = \frac{x}{x^*}, \quad \tilde{\theta} = \Delta T^* = \frac{T - T_{res}}{\Delta T^*}, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho^*}, \quad \tilde{\eta} = 1 - \frac{\rho_f}{\rho_f^*}, \quad \tilde{u} = \frac{u_{inj}}{u^*}. \quad (5.5)$$

Em (5.5)  $\tilde{\eta}$  representa a profundidade do combustível imóvel. A escolha das variáveis adimensionais é comum na engenharia do petróleo. Aqui é usada com a finalidade de nos ajudar a reescrever o sistema (5.1) - (5.3) na forma de um problema de complementaridade.

Nossa escolha para as quantidades referenciais são:

$$t^* = Q_r \rho_f^{res}, \quad \rho^* = \frac{P}{RT_{res}}, \quad \Delta T^* = \frac{t^*}{C_m}, \quad x^* = c_g \rho^* \Delta T^*, \quad \rho_f^* = \rho_f^{res}, \quad u^* = \frac{x^*}{t^*}, \quad (5.6)$$

onde  $T_{res}$  e  $\rho_f^{res}$  são a temperatura inicial do reservatório e densidade molar do combustível,  $u_{inj}$  é a velocidade de injeção do gás. Em (5.6),  $t^*$  é o tempo característico para a combustão do combustível na temperatura inicial do reservatório  $T_{res}$ ;  $\Delta T^*$  é o desvio da temperatura de pico com respeito à temperatura do reservatório, para o caso de combustão completa de combustível sob condições adiabáticas.

Usando (5.5) e (5.6) e omitindo as tils, as equações (5.1)-(5.4) são escritas em forma adimensional como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial(\rho \theta)}{\partial x} = \frac{1}{Pe_T} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \Phi, \quad (5.7)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \Phi, \quad (5.8)$$

$$\rho = \frac{\theta_0}{\theta + \theta_0}, \quad (5.9)$$

$$\Phi = \beta(1 - \eta) \exp\left(-\frac{\mathcal{E}}{\theta + \theta_0}\right), \quad (5.10)$$

com constantes adimensionais:

$$Pe_T = \frac{x^*}{\lambda \Delta T^*}, \quad \beta = \rho_f^* k_p Q_r, \quad \mathcal{E} = \frac{E_r}{R \Delta T^*}, \quad \theta_0 = \frac{T_{res}}{\Delta T^*}, \quad u = \frac{u_{inj} t^*}{x^*}. \quad (5.11)$$

Aqui  $Pe_T$  é o número de Peclet para difusão térmica,  $u$  torna-se a velocidade da onda térmica adimensional,  $\mathcal{E}$  é a energia de ativação escalada e  $\theta_0$  é a temperatura do reservatório escalado.

O sistema (5.7) - (5.10) deve ser resolvido com as condições do reservatório iniciais:

$$t = 0, x \geq 0 : \quad \theta = 0, \eta = 0, \quad (5.12)$$

e as condições de injeção:

$$t \geq 0, x = 0 : \quad \theta = 0, \eta = 1. \quad (5.13)$$

Observe que a onda de combustão é uma “onda transiente” e não uma onda viajante. Seguindo a [2], podemos transformar o sistema (5.7) - (5.8) na seguinte desigualdade variacional:

$$\theta \geq 0, \eta \geq 0 : \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial(\rho \theta)}{\partial x} - \frac{1}{Pe_T} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \Phi \geq 0, \quad (5.14a)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} - \Phi \geq 0, \quad (5.14b)$$

$$\left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial(\rho \theta)}{\partial x} - \frac{1}{Pe_T} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \Phi \right) \theta = 0, \quad (5.15a)$$

$$\left( \frac{\partial \eta}{\partial t} - \Phi \right) \eta = 0. \quad (5.15b)$$

Nós precisamos que a equação (5.15) seja satisfeita no extremo direito do intervalo, onde a equação (5.7) pode não ser satisfeita. Isto explica a escolha de variáveis adimensionais  $\eta$  em (5.5) descrevendo a profundidade do combustível dentro do reservatório.

## 5.2 DESCRIÇÃO DOS ESQUEMAS NUMÉRICOS

Nesta seção descreveremos com detalhe o esquema de diferenças finitas para o modelo de Combustão de Oxigênio In-Situ para os métodos de FDA–NCP e de Crank–Nicolson–Newton, para isto utilizaremos a malha descrita no Capítulo 2 e novamente aplicamos o método de Crank–Nicolson para aproximar as derivadas espaciais em cada caso, isto é:

$$\partial_t w(x_m, t_{n+\frac{1}{2}}) = \frac{w_m^{n+1} - w_m^n}{k}, \quad (5.16a)$$

$$\partial_{xx} w(x_m, t_{n+\frac{1}{2}}) = \frac{w_{m+1}^{n+1} - 2w_m^{n+1} + w_{m-1}^{n+1}}{2h^2} + \frac{w_{m+1}^n - 2w_m^n + w_{m-1}^n}{2h^2}, \quad (5.16b)$$

$$\partial_x F(w(x_m, t_{n+\frac{1}{2}})) = \frac{F_{m+1}^{n+1} - F_{m-1}^{n+1}}{4h} + \frac{F_{m+1}^n - F_{m-1}^n}{4h}, \quad (5.16c)$$

$$\Phi(w(x_m, t_{n+\frac{1}{2}})) = \frac{\Phi_m^{n+1} + \Phi_m^n}{2}. \quad (5.16d)$$

Nos pontos da fronteira  $m = 0$  e  $m = M$  temos as seguintes condições de fronteira:

$$w(x_0, t) = \begin{pmatrix} \theta(x_0, t) \\ \eta(x_0, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

e

$$\frac{\partial w}{\partial x}(x_M, t) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \theta}{\partial x}(x_M, t) \\ \frac{\partial \eta}{\partial x}(x_M, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Isto é, temos uma condição de Dirichlet no ponto  $x_0$  e uma condição de Neumann no ponto  $x_M$ , logo, o valor em  $x_0$  é conhecido em todo tempo mas não assim o valor em  $x_M$ .

$$w_0^{n+1} = w_0^n, \quad \text{para todo } n \in \mathbb{N}. \quad (5.17)$$

A condição de fronteira em  $x_M$  fornece:

$$\frac{\partial w}{\partial x}(x_M, t) = 0 \Rightarrow \frac{w_{M+1}^n - w_{M-1}^n}{2h} = 0,$$

portanto

$$w_{M+1}^n = w_{M-1}^n \Rightarrow F_{M+1}^n = F_{M-1}^n \quad \text{para todo } n \in \mathbb{N}. \quad (5.18)$$

### 5.2.1 Método FDA-NCP

Neste primeiro caso vamos a aplicar o FDA-NCP a um problema parabólico não linear [12]. Para isto, vamos considerar  $w = \begin{pmatrix} \theta \\ \eta \end{pmatrix}$ , então as relações (5.14) e (5.15) ficam:

$$w \geq 0, \quad w_t + [F(w)]_x - Hw_{xx} - \Psi \geq 0, \quad (5.19a)$$

$$G(w) \bullet w = 0, \quad (5.19b)$$

onde:

$$G(w) = w_t + [F(w)]_x - Hw_{xx} - \Psi = \begin{pmatrix} \frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial(\rho\theta)}{\partial x} - \frac{1}{Pe_T} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \Phi \\ \frac{\partial \eta}{\partial t} - \Phi \end{pmatrix}, \quad (5.20a)$$

$$F(w) = \begin{pmatrix} \frac{u\theta_0\theta}{\theta_0 + \theta} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} \frac{1}{Pe_T} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \Psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ \Phi \end{pmatrix}. \quad (5.20b)$$

Para obter as relações discretas de (5.19) substituímos (5.16) em (5.19a), para isto consideramos (5.20a) para obter:

$$\begin{aligned} -2\mu H w_{m-1}^{n+1} + (4 + 4\mu H)w_m^{n+1} - 2\mu H w_{m+1}^{n+1} + \lambda[F_{m+1}^{n+1} - F_{m-1}^{n+1}] - 2k\Psi_m^{n+1} &\geq \\ &\geq 2\mu H w_{m-1}^n + (4 - 4\mu H)w_m^n + 2\mu H w_{m+1}^n - \lambda[F_{m+1}^n - F_{m-1}^n] + 2k\Psi_m^n, \end{aligned} \quad (5.21)$$

onde  $\lambda = \frac{k}{h}$  e  $\mu = \frac{k}{h^2}$ . O esquema de diferenças é válido para todo  $m = 1, 2, \dots, M$  dos pontos que não são conhecidos os valores.

Ora, nos pontos de fronteira temos que para  $m = 1$ , substituindo (5.17) em (5.21) obtemos:

$$\begin{aligned} (4 + 4\mu H)w_1^{n+1} - 2\mu H w_2^{n+1} + \lambda[F_2^{n+1} - F_0^{n+1}] - 2k\Psi_1^{n+1} &\geq \\ &\geq (4 - 4\mu H)w_1^n + 2\mu H w_2^n - \lambda[F_2^n - F_0^n] + 2k\Psi_1^n + 4\mu H w_0^n. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Para  $m = M$ , substituindo (5.18) em (5.21) tem-se:

$$-4\mu H w_{M-1}^{n+1} + (4 + 4\mu H)w_M^{n+1} - 2k\Psi_M^{n+1} \geq 4\mu H w_{M-1}^n + (4 - 4\mu H)w_M^n + 2k\Psi_M^n. \quad (5.23)$$

Portanto, (5.21) é válido para todo  $m = 2, \dots, M - 1$  e unindo as expressões (5.22) e (5.23) obtemos a seguinte desigualdade na variável  $W^{n+1}$ :

$$G^n(W^{n+1}) = Aw^{n+1} + \lambda T(W^{n+1}) - 2k\Psi(W^{n+1}) - LD(W^n) \geq 0, \quad (5.24)$$

onde  $LD(W^n) = BW^n - \lambda T(W^n) + 2k\Psi(W^n) + UR$  é conhecido em cada instante do tempo. Além disso:

$$A = \begin{pmatrix} (4 + 4\mu H) & -2\mu H & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -2\mu H & (4 + 4\mu H) & -2\mu H & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2\mu H & (4 + 4\mu H) & -2\mu H & & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & -2\mu H & (4 + 4\mu H) & -2\mu H \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -4\mu H & (4 + 4\mu H) \end{pmatrix}, \quad (5.25)$$

$$B = \begin{pmatrix} (4 - 4\mu H) & 2\mu H & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 2\mu H & (4 - 4\mu H) & 2\mu H & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\mu H & (4 - 4\mu H) & 2\mu H & & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 2\mu H & (4 - 4\mu H) & 2\mu H \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 4\mu H & (4 - 4\mu H) \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

$$T^n = T(W^n) = \begin{pmatrix} F_2^n - F_0^n \\ F_3^n - F_1^n \\ F_4^n - F_2^n \\ \vdots \\ F_M^n - F_{M-2}^n \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi^n = \Psi(W^n) = \begin{pmatrix} \Psi_1^n \\ \Psi_2^n \\ \Psi_3^n \\ \vdots \\ \Psi_{M-1}^n \\ \Psi_M^n \end{pmatrix}, \quad (5.27)$$

$$W^n = \begin{pmatrix} w_1^n \\ w_2^n \\ w_3^n \\ \vdots \\ w_{M-1}^n \\ w_M^n \end{pmatrix}, \quad e \quad UR = \begin{pmatrix} 4qHw_0^n \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.28)$$

onde  $A, B \in \mathbb{R}^{sM \times sM}$ ;  $w^n, T^n, \Psi^n \in \mathbb{R}^{sM}$ .

Portanto, a forma discreta de (5.19a) é dada por (5.24). Do mesmo jeito, substituímos (5.16) em (5.19b) para obter sua forma discreta, dado por:

$$G^n(W^{n+1}) \bullet W^{n+1} = 0, \quad (5.29)$$

além disso, deve-se cumprir:

$$W^{n+1} \geq 0. \quad (5.30)$$

Assim, juntando (5.24), (5.29) e (5.30) formam um Problema de Complementaridade que pode ser resolvido pelo Algoritmo FDA–NCP desenvolvido no Capítulo 3.

O que for feito até agora será resumido no Algoritmo 5 mostrado a seguir.

**Algoritmo 5** (Implementação FDA–NCP).

**Passo 1** Fazer  $n = 0$  e  $N = 1/\Delta t$ .

**Passo 2** Para obter  $W^{n+1}$  aplicamos o método FDA–NCP descrito no Algoritmo 2 para resolver o problema de complementaridade:

$$\begin{aligned} G^n(W^{n+1}) \bullet W^{n+1} &= 0, \quad W^{n+1} \geq 0 \quad \text{e} \\ G^n(W^{n+1}) &= Aw^{n+1} + pT(W^{n+1}) - 2k\Psi(W^{n+1}) - LD(W^n) \geq 0, \end{aligned}$$

onde as matrizes  $A$ ,  $B$  e os vetores  $T$ ,  $\Psi$ ,  $W$  e  $UR$  são dadas em (5.25), (5.26), (5.27) e (5.28).

**Passo 3** Se  $n = N$  então **FIM**. Senão  $n \leftarrow n + 1$  e voltar ao Passo 2.

Os resultados numéricos obtidos da implementação do Algoritmo 3 no Matlab são mostrados na Seção 5.2.3.

## 5.2.2 Método de Crank–Nicolson–Newton

Nesta seção descreveremos o método de Crank–Nicolson para a seguinte equação:

$$\partial_t w + \partial_x F(w) = \partial_x(Hw_x) + \Phi(w), \quad (5.31)$$

onde:

$$w : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^s, \quad F : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^s, \quad \Phi : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^s, \quad H \in \mathbb{R}^{s \times s}, \quad (5.32)$$

Substituindo (5.16) em (5.31) obtemos a seguinte equação de diferenças:

$$\begin{aligned} -2\mu H w_{m-1}^{n+1} + (4 + 4\mu H)w_m^{n+1} - 2\mu H w_{m+1}^{n+1} + p(F_{m+1}^{n+1} - F_{m-1}^{n+1}) + 2k\Phi_m^{n+1} &= \\ = 2\mu H w_{m-1}^n + (4 - 4\mu H)w_m^n + 2\mu H w_{m+1}^n - p(F_{m+1}^n - F_{m-1}^n) + 2k\Phi_m^n, \end{aligned} \quad (5.33)$$

onde  $\lambda = \frac{k}{h}$  e  $\mu = \frac{k}{h^2}$ , a qual é válida para todo  $m = 1, \dots, M$ .

No ponto de fronteira  $m = 1$ , substituímos (5.17) em (5.33) para obter:

$$\begin{aligned} (4 + 4\mu H)w_1^{n+1} - 2\mu H w_2^{n+1} + p(F_2^{n+1} - F_0^{n+1}) - 2k\Phi_1^{n+1} &= \\ = (4 - 4\mu H)w_1^n + 2\mu H w_2^n - p(F_2^n - F_0^n) + 2k\Phi_1^n + 4\mu H w_0^n. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Para  $m = M$ , substituindo (5.18) em (5.33) obtemos:

$$-4\mu H w_{M-1}^{n+1} + (4 + 4\mu H)w_M^{n+1} - 2k\Phi_M^{n+1} = 4\mu H w_{M-1}^n + (4 - 4\mu H)w_M^n + 2k\Phi_M^n. \quad (5.35)$$

Portanto, (5.33) é válido para todo  $m = 2, \dots, M-1$  e unindo as expressões (5.34) e (5.35) obtemos o sistema não linear na variável  $W^{n+1}$ :

$$AW^{n+1} + pT(W^{n+1}) - 2k\Psi(W^{n+1}) - LD(W^n) = 0, \quad (5.36)$$

onde  $LD(W^n) = BW^n - pT(W^n) + 2k\Psi(W^n) + UR$ . Além disso, as matrizes  $A$  e  $B$  são dadas por (5.25) e (5.26), os vetores  $T, \Psi, UR$  são dados por (5.27) e (5.28).

Para resolver (5.36) empregamos o método de Newton, o qual precisa da matriz jacobiana de:

$$G^n(W^{n+1}) = AW^{n+1} + pT(W^{n+1}) - 2k\Psi(W^{n+1}) - LD(W^n), \quad (5.37)$$

onde o vetor  $LD(W^n)$  é conhecido em cada instante do tempo  $n$ .

Note que a matriz Jacobiana de  $G^n$  é obtida mediante :

$$JG = A + S, \quad (5.38)$$

onde  $S \in \mathbb{R}^{sM \times sM}$  é a matriz seguinte:

$$S = \begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial u}(u_0^{n+1}) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -p \frac{\partial F}{\partial u}(u_0^{n+1}) & \frac{\partial \Phi}{\partial u}(u_2^{n+1}) & p \frac{\partial F}{\partial u}(u_2^{n+1}) & & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & & -p \frac{\partial F}{\partial u}(u_{M-2}^{n+1}) & \frac{\partial \Phi}{\partial u}(u_{M-1}^{n+1}) & p \frac{\partial F}{\partial u}(u_M^{n+1}) \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial \Phi}{\partial u}(u_M^{n+1}) \end{pmatrix}$$

Conhecido o Jacobiano de  $G$  pode-se aplicar o método de Newton (5.39) onde dado um ponto inicial  $(W^{n+1})_0$  procede-se a resolução do sistema linear:

$$\begin{aligned} JG((W^{n+1})_k) d_k &= -G((W^n)_k), \\ (W^{n+1})_{k+1} &= (W^{n+1})_k + d_k, \\ k &= k + 1, \end{aligned} \quad (5.39)$$

para encontrar a solução de (5.36) até uma tolerância estabelecida.

Abaixo passamos a descrever o método de Crank–Nicolson–Newton aplicada à equação (5.31).

**Algoritmo 6** (Implementação Crank–Nicolson–Newton).

**Passo 1** Fazer  $n = 0$  e  $N = 1/\Delta t$ .

**Passo 2** Resolvemos o sistema não linear pelo método de Newton, Algoritmo 1:

$$G^n(W^{n+1}) = AW^{n+1} + pT(W^{n+1}) - 2k\Psi(W^{n+1}) - LD(W^n),$$

onde as matrizes  $A$ ,  $B$  e os vetores  $T$ ,  $\Psi$ ,  $W$  e  $UR$  são dadas em (5.25), (5.26), (5.27) e (5.28). Neste passo obtemos o valor  $W^{n+1}$ .

**Passo 3** Se  $n = N$  então **FIM**. Senão  $n \leftarrow n + 1$  e voltar ao Passo 2.

Os resultados obtidos ao implementar o Algoritmo 6 no Matlab são mostrados na Seção 5.2.3.

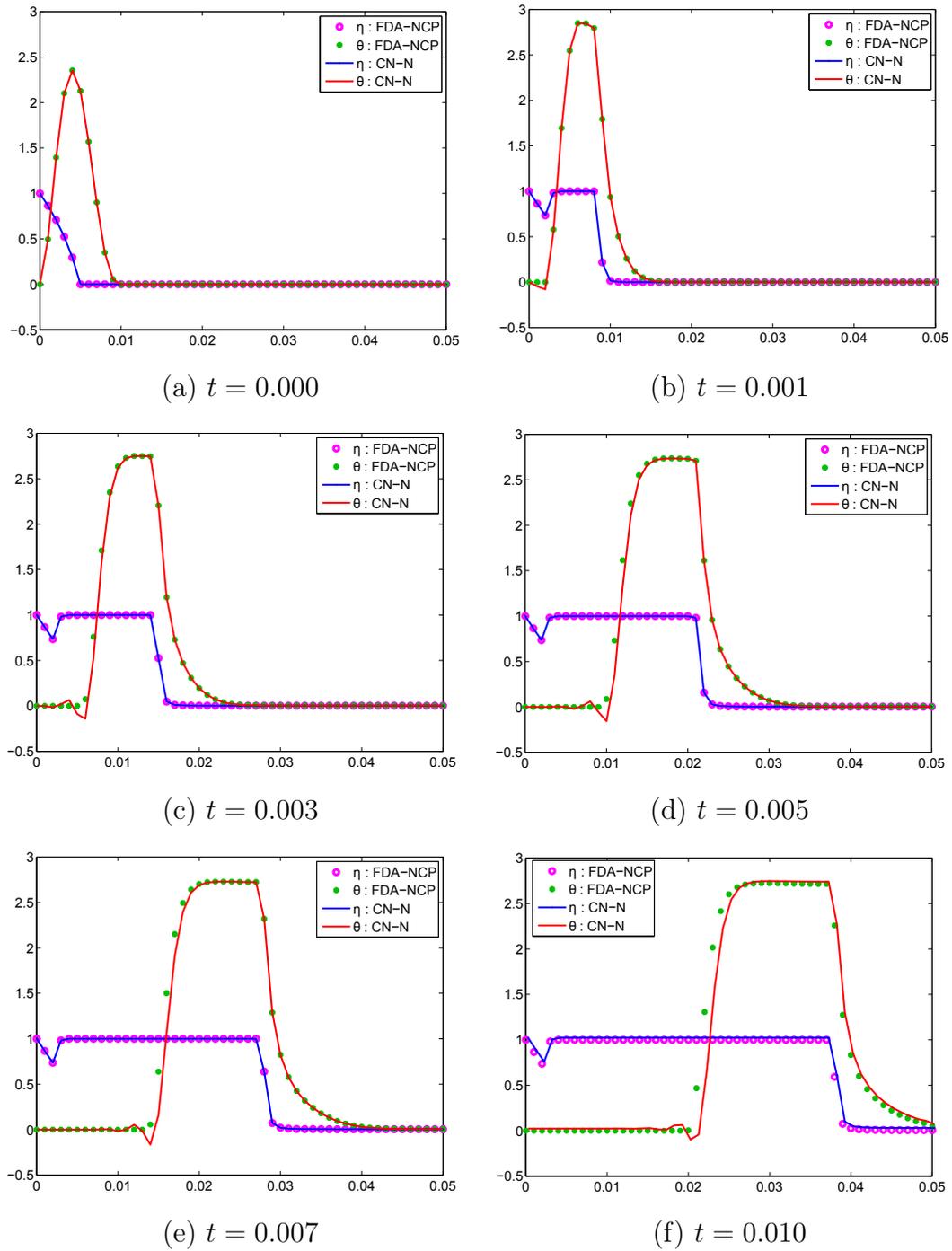
### 5.2.3 Comparação dos Métodos FDA–NCP com Crank–Nicolson–Newton

Nesta seção apresentamos os resultados numéricos das simulações feitas no Matlab, para as quais consideramos  $[x_0, x_M] = [0, 0.05]$  e  $[t_0, t_N] = [0, 1]$  como os intervalos de espaço e tempo respectivamente. Mantemos o número de subintervalos em tempo constante e igual a  $N = 10^5$ , isto é,  $k = \Delta t = 10^{-5}$  enquanto o número de subintervalos em espaço serão iguais a  $M = 50, 100, 200$ . Para o método FDA–NCP consideramos uma tolerância de erro de  $10^{-8}$ .

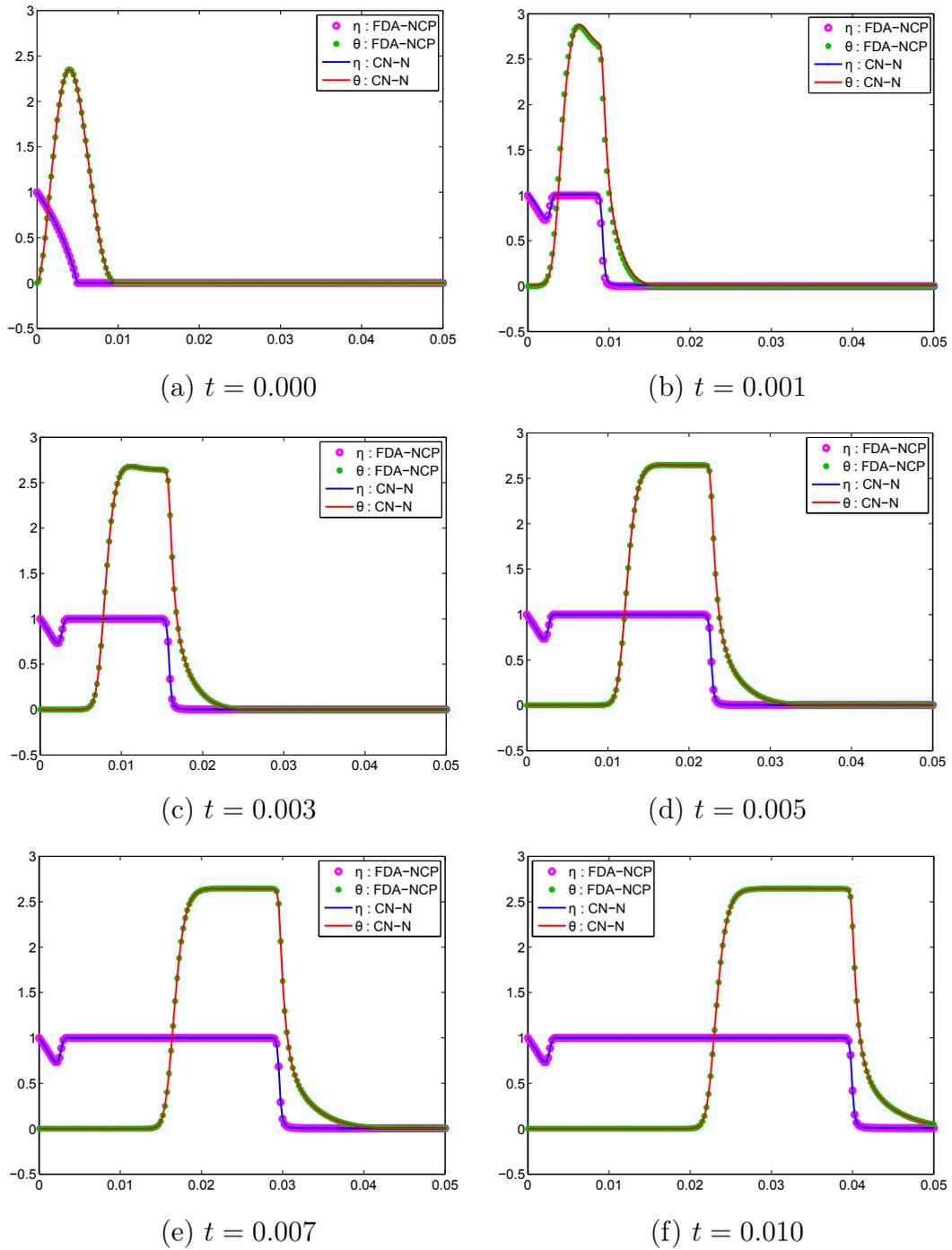
Os valores dos parâmetros adimensionais em (5.11) são:

$$\begin{aligned} x^* &= 9.1 \cdot 10^4 [m], & t^* &= 1.48 \cdot 10^8 [s], & \Delta T^* &= 74.4 [K], & u^* &= 6.1 \cdot 10^{-4}, \\ Pe_T &= 1406, & \beta &= 7.44 \cdot 10^{10}, & \mathcal{E} &= 93.8, & \theta_0 &= 3.67, & u &= 3.76. \end{aligned}$$

Com os dados de entrada anteriores obtemos as Figuras 5.2 e 5.3, as quais mostram os resultados obtidos pelos Algoritmos 5 e 6 para o método FDA–NCP e Crank–Nicolson–Newton respectivamente. Observe que os dois métodos coincidem para os tempos indicados.



**Figura 5.2:** Comparação dos métodos de Crank–Nicolson com Newton e FDA–NCP para  $M = 50$  nos instantes de tempo indicados. Os valores de  $\eta$  são representados por bolinhas rosas e linha contínua azul, enquanto os valores de  $\theta$  são representados por bolinhas verdes e linha contínua vermelha.



**Figura 5.3:** Comparação dos métodos de Crank–Nicolson com Newton e FDA–NCP para  $M = 200$  nos instantes de tempo indicados. Os valores de  $\eta$  são representados por bolinhas rosas e linha contínua azul, enquanto os valores de  $\theta$  são representados por bolinhas verdes e linha contínua vermelha.

**Tabela 5.2:** Comparação do tempo de processo computacional com  $M = 50$  para os métodos FDA–NCP e de Crank–Nicolson com Newton. O  $t(n)$  é o tempo em segundos que demorou o método em encontrar a solução no instante de tempo  $t$ .

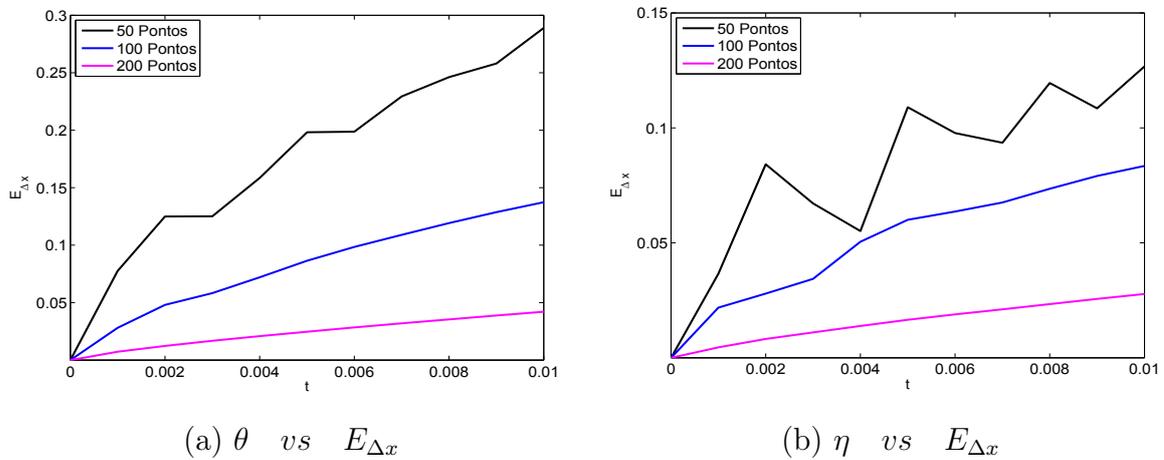
t	FDA–NCP		Crank–Nicolson com Newton	
	$t(n)$	Iterações	$t(n)$	Iterações
0.001	0.245	20	0.014	3
0.002	0.255	20	0.011	3
0.003	0.255	20	0.010	3
0.004	0.263	20	0.014	3
0.005	0.331	21	0.014	3
0.006	0.309	21	0.013	3
0.007	0.264	21	0.012	3
0.008	0.258	21	0.012	3
0.009	0.312	21	0.012	3
0.01	0.263	21	0.013	3

**Tabela 5.3:** Comparação do tempo de processo computacional com  $M = 200$  para os métodos FDA–NCP e Crank–Nicolson com Newton. O  $t(n)$  é o tempo em segundos que demorou o método em encontrar a solução no instante de tempo  $t$ .

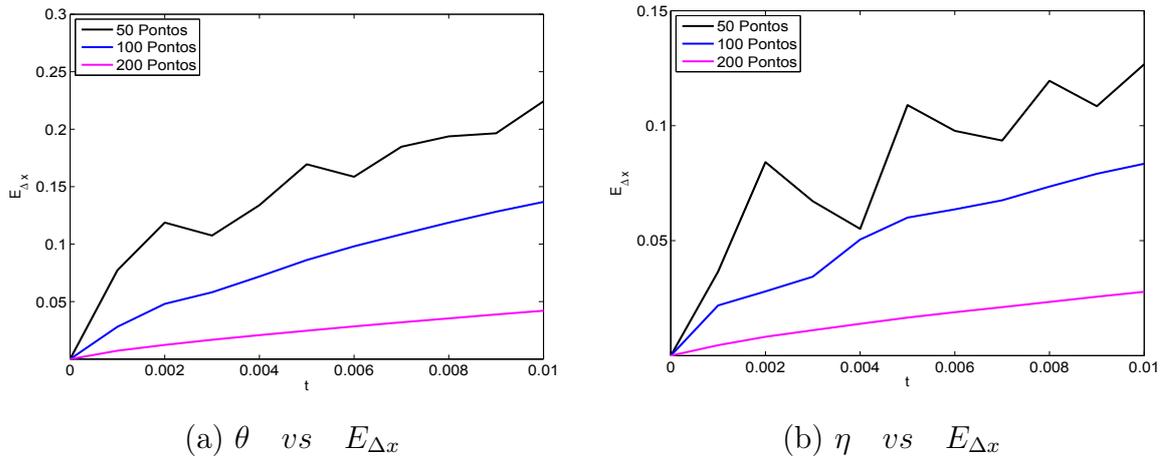
t	FDA–NCP		Crank–Nicolson com Newton	
	$t(n)$	Iterações	$t(n)$	Iterações
0.001	4.986	21	0.049	3
0.002	4.696	21	0.061	3
0.003	3.537	21	0.054	3
0.004	3.702	21	0.048	3
0.005	3.672	21	0.048	3
0.006	3.905	21	0.056	3
0.007	3.743	21	0.061	3
0.008	4.573	21	0.054	3
0.009	4.785	22	0.056	3
0.01	5.298	22	0.058	3

### 5.2.4 Análise de Erro

Nesta seção faremos a análise de erro para o FDA–NCP e Crank–Nicolson com Newton segundo a Tabela 2.1 da Seção 2.2 e com a norma (2.7) para cada instante de tempo e  $E_{\Delta x}$  onde  $\Delta x = h, h/2, h/4$ . O comprimento do subintervalo em tempo será constante e igual a  $\Delta t = k = 10^{-5}$  e  $h = \frac{1}{50}$ . As Tabelas 5.4 e 5.5 mostram os resultados para os Erros Relativos do método de FDA–NCP enquanto as Tabelas 5.6 e 5.7 mostram o Erro Relativo para o método de Crank–Nicolson com Newton e são representados nas Figuras 5.4 e 5.5.



**Figura 5.4:** Tempo ( $t$ ) vs  $E_{\Delta x}$ . Erro Relativo do método FDA–NCP. Aqui  $\Delta x = \frac{1}{50}, \frac{1}{100}$  e  $\frac{1}{200}$ .



**Figura 5.5:** Tempo ( $t$ ) vs  $E_{\Delta x}$ . Erro Relativo do método Crank–Nicolson–Newton. Aqui  $\Delta x = \frac{1}{50}, \frac{1}{100}$  e  $\frac{1}{200}$ .

**Tabela 5.4:** Erro Relativo para  $\theta$  com FDA–NCP e  $h = \frac{1}{50}$  para os instantes de tempo “ $t$ ” indicados na primeira coluna.

$t$	$E_h$	$E_{h/2}$	$E_{h/4}$	$\frac{E_h}{E_{h/2}}$	$\frac{E_{h/2}}{E_{h/4}}$
0.001	0.07753953	0.02808885	0.00730328	2.76	3.85
0.002	0.12490382	0.04804832	0.01233527	2.60	3.89
0.003	0.12507648	0.05824052	0.01679940	2.15	3.47
0.004	0.15841526	0.07200834	0.02080540	2.20	3.46
0.005	0.19818512	0.08645353	0.02467944	2.29	3.50
0.006	0.19869586	0.09841770	0.02841001	2.02	3.46
0.007	0.22940100	0.10893437	0.03196011	2.10	3.41
0.008	0.24613384	0.11917200	0.03539747	2.07	3.37
0.009	0.25797041	0.12872819	0.03877948	2.00	3.32
0.010	0.28897837	0.13736335	0.04210642	2.10	3.26

**Tabela 5.5:** Erro Relativo para  $\eta$  com FDA–NCP e  $h = \frac{1}{50}$  para os instantes de tempo “  $t$  ” indicados na primeira coluna.

$t$	$E_h$	$E_{h/2}$	$E_{h/4}$	$\frac{E_h}{E_{h/2}}$	$\frac{E_{h/2}}{E_{h/4}}$
0.001	0.03656752	0.02183277	0.00451876	1.67	4.83
0.002	0.08415103	0.02792385	0.00819578	3.01	3.41
0.003	0.06714517	0.03432836	0.01103751	1.96	3.11
0.004	0.05513010	0.05046448	0.01382034	1.09	3.65
0.005	0.10898570	0.06002658	0.01653867	1.82	3.63
0.006	0.09776211	0.06361489	0.01887480	1.54	3.37
0.007	0.09351854	0.06753575	0.02106120	1.38	3.21
0.008	0.11952653	0.07350797	0.02332674	1.63	3.15
0.009	0.10846255	0.07909222	0.02560830	1.37	3.09
0.010	0.12671978	0.08344353	0.02776237	1.52	3.01

**Tabela 5.6:** Erro Relativo para  $\theta$  com Crank–Nicolson–Newton com  $h = \frac{1}{50}$  e para os instantes de tempo “  $t$  ” indicados na primeira coluna.

$t$	$E_h$	$E_{h/2}$	$E_{h/4}$	$\frac{E_h}{E_{h/2}}$	$\frac{E_{h/2}}{E_{h/4}}$
0.001	0.07723325	0.02810124	0.00730328	2.75	3.85
0.002	0.11878779	0.04801622	0.01233524	2.47	3.89
0.003	0.10746465	0.05812093	0.01679931	1.85	3.46
0.004	0.13391440	0.07180871	0.02080525	1.86	3.45
0.005	0.16943826	0.08618848	0.02467926	1.97	3.49
0.006	0.15855661	0.09808678	0.02840980	1.62	3.45
0.007	0.18473219	0.10853533	0.03195988	1.70	3.40
0.008	0.19374520	0.11870549	0.03539723	1.63	3.35
0.009	0.19643579	0.12819357	0.03877919	1.53	3.31
0.010	0.22423688	0.13675696	0.04210603	1.64	3.25

**Tabela 5.7:** Erro Relativo para  $\eta$  com Crank–Nicolson–Newton com  $h = \frac{1}{50}$  e para os instantes de tempo “  $t$  ” indicados na primeira coluna.

$t$	$E_h$	$E_{h/2}$	$E_{h/4}$	$\frac{E_h}{E_{h/2}}$	$\frac{E_{h/2}}{E_{h/4}}$
0.001	0.03656747	0.02183278	0.00451876	1.67	4.83
0.002	0.08415136	0.02792388	0.00819576	3.01	3.41
0.003	0.06714673	0.03432831	0.01103747	1.96	3.11
0.004	0.05513145	0.05046440	0.01382027	1.09	3.65
0.005	0.10898650	0.06002657	0.01653858	1.82	3.63
0.006	0.09776327	0.06361493	0.01887469	1.54	3.37
0.007	0.09351998	0.06753574	0.02106107	1.38	3.21
0.008	0.11952702	0.07350793	0.02332659	1.63	3.15
0.009	0.10846323	0.07909218	0.02560812	1.37	3.09
0.010	0.12672058	0.08344350	0.02776217	1.52	3.01

Observe que os quocientes  $E_{\Delta x}/E_{\Delta x/2}$   $\Delta x = h, h/2$  são maiores para o método FDA–NCP em relação ao método de Crank–Nicolson–Newton, isto indica uma maior diminuição do erro para o FDA–NCP.

### 5.3 APLICANDO LEIS DE CONSERVAÇÃO

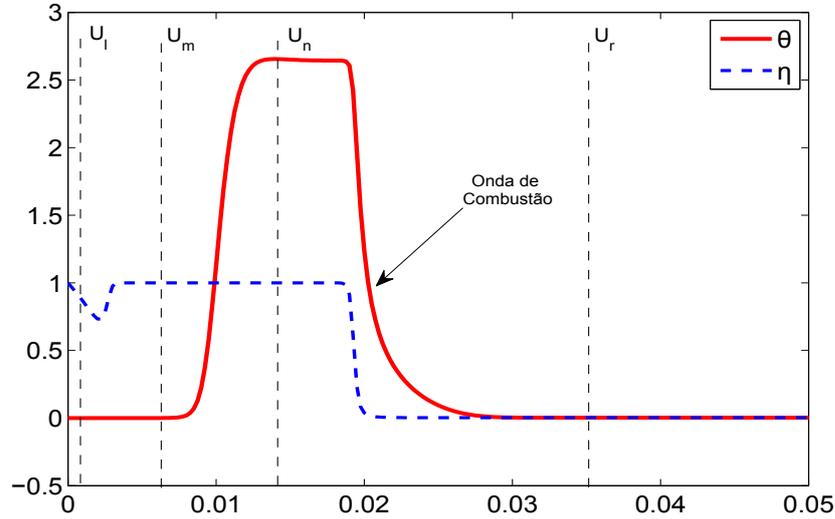
Nesta seção vamos a procurar ondas que não são de combustão do sistema (5.7) - (5.10), para isto desprezamos o termo fonte  $\Phi$  que é o coeficiente de combustão da lei de Arrhenius. Além disso, o termo  $\theta_{xx}$  pode ser desprezado pois as soluções são autosimilares. Portanto, o sistema (5.7) - (5.10) é reduzido ao seguinte Problema de Riemann:

$$\begin{aligned} \theta_t + \left[ \frac{u\theta_0\theta}{\theta + \theta_0} \right]_x &= 0 \\ \eta_t &= 0 \end{aligned} \quad (5.40)$$

com estado à esquerda:  $U_l = \begin{pmatrix} \theta_l \\ \eta_l \end{pmatrix}$  e estado à direita:  $U_r = \begin{pmatrix} \theta_r \\ \eta_r \end{pmatrix}$ .

Observe que (5.40) é o problema tratado em (1.8) o qual é uma lei de conservação estritamente hiperbólico com uma onda de contato e uma onda de choque quando  $\theta_r > \theta_l$  segundo o mostrado em (1.67).

Considerando o instante de tempo  $t = 0.005$  mostram-se na Figura 5.6 duas ondas: onda de combustível (ou onda de contato) para o combustível  $\eta$  e a onda térmica (ou onda de choque) para a temperatura  $\theta$ .



**Figura 5.6:** Estados para o Problema de Riemann para obter a Onda de Combustível e a Onda Térmica. A linha de traços azul representa o combustível  $\eta$  e a linha vermelha representa a temperatura  $\theta$ .

Procura-se o estado intermediário:  $U_m = \begin{pmatrix} \theta_m \\ \eta_m \end{pmatrix}$  onde  $\theta_m < \theta_n$ .

A condição de Rankine-Hugoniot (1.61) para o Problema de Riemann (5.40) mostra que as velocidades das ondas são:

$$s = 0 \quad \text{ou} \quad (5.41a)$$

$$s = \frac{u\theta_0^2}{(\theta_l + \theta_0)(\theta_r + \theta_0)} \quad (5.41b)$$

### 5.3.1 Onda de Combustível

Para obter a onda de combustível aplicamos a condição de Rankine-Hugoniot para os estados  $U_l$  à esquerda e  $U_m$  à direita. Então, de (5.41) obtemos que  $s_1 = s = 0$  e portanto (1.17a) mostra que  $\theta_m = \theta_l = 0$ . Isto é, a temperatura mantém-se constante mas a onda de combustível  $\eta$  está variando com uma velocidade  $s_1 = 0$  como pode-se observar na Figura 5.3.

### 5.3.2 Onda Térmica

Para obter a onda de térmica aplicamos a condição de Rankine-Hugoniot para os estados  $U_m$  à esquerda e  $U_n$  à direita. De (5.41b) temos que  $s_2 = s$  e (1.17a) mostra que  $\eta_m = \eta_n = 1$ . Portanto, o combustível mantém-se constante mas a onda térmica  $\theta$  está variando com uma velocidade  $s_2 = \frac{u\theta_0^2}{(\theta_m + \theta_0)(\theta_n + \theta_0)}$  como pode observarse na Figura 5.6.

Agora vamos a calcular a velocidade da onda térmica  $s_2$ . Da Figura 5.6 temos que  $\theta_r \approx 2.7$ , lembrando que  $u = 3.76$  e  $\theta_0 = 3.67$ , obtemos de (5.41b) o valor teórico  $s_2^T = 2.16$ . Observe que da Figura 5.3 temos que do tempo  $t = 0.001$  até o tempo  $t = 0.01$  a onda teve um deslocamento de  $\Delta x \approx 0.0211$ , então obtemos a velocidade numérica:

$$s_2^N = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{0.0211}{0.1 - 0.001} = 2.34. \quad (5.42)$$

Observe que o resultado numérico  $s_2^N$  aproxima-se ao resultado teórico  $s_2^T$ .

### 5.3.3 Onda de Combustão

Para obter a onda de combustão como solução do Problema de Riemann precisamos que  $\Phi$  seja nula nos dois lados da onda mas isso não acontece.

Ao considerar o termo fonte  $\Phi$  no sistema (5.7)-(5.10) já não teríamos uma lei de conservação. Portanto, não é possível procurar uma solução na forma de onda viajante para a onda de combustão.

## 5.4 CONCLUSÕES PARCIAIS

Propõe-se um método numérico baseado num esquema de diferenças finitas implícito e um algoritmo de complementaridade não linear que podem ser aplicados a problemas parabólicos que podem ser reescritos na forma de um problema de complementaridade. Este método é aplicado ao sistema (5.7) que descreve a combustão de oxigênio in situ.

Resolve-se o modelo de combustão de oxigênio in situ usando o algoritmo de complementaridade não linear e é comparado com o esquema de diferenças finitas de Crank-Nicolson com Newton. As soluções obtidas são muito próximas e as comparações dos resultados são mostrados na Figura 5.3.

O algoritmo de complementaridade pode ser usado com um número menor de pontos

na discretização espacial, pois nesses casos o esquema de Crank–Nicolson com Newton da valores negativos para a temperatura.

As Tabelas 5.4 e 5.5 mostram uma boa evidência de uma convergência linear do algoritmo de complementaridade.

Os erros relativos mostrados nas Tabelas 5.4 e 5.5 indicam como era de se esperar um crescimento linear quando refinamos a malha para ambos métodos. Apesar do crescimento linear do erro relativo, vemos que a diferença entre duas soluções decresce conforme refinamos a malha, isto é uma boa evidência de que ambos métodos convergem para a mesma solução. A diferença em tempo de processo computacional acrescenta-se quando refinamos a malha no espaço segundo mostram As Tabelas 5.2 e 5.3 em cada instante de tempo para o FDA–NCP e Crank–Nicolson com Newton, respectivamente.

Fizemos análise das ondas térmica e de combustível via solução de problema de Riemann, obtivemos a velocidade da onda térmica e comparamos com as simulações obtendo o erro menor que 8%.

## 6 CONCLUSÕES

Neste capítulo fazemos um resumo das conclusões parciais do Capítulo 4 e do Capítulo 5, nesses capítulos descrevemos o modelo de difusão de oxigênio e o modelo de combustão de oxigênio in situ respectivamente. Para cada um deles foi aplicado o método de FDA–NCP e o método de Crank–Nicolson com Newton, comparamos as soluções obtidas e fizemos a análise de erro respectivo. As conclusões serão detalhadas nos parágrafos seguintes.

Conseguimos obter a solução aproximada do modelo de difusão de oxigênio dado pelo sistema (4.8) - (4.11) utilizando um esquema de diferenças finitas e um algoritmo de complementaridade não linear FDA–NCP. Para simular a fase da difusão de oxigênio, começamos com a solução de equilíbrio (solução estacionária) e a partir dela obtemos a concentração de oxigênio através do tempo. Os resultados obtidos coincidem com os resultados apresentados em [13] e [11] como pode-se observar nas Figuras 4.3 e 4.4. Na análise de erro, temos uma maior redução do erro para o método FDA–NCP em relação ao método de Crank–Nicolson segundo mostram as Tabelas 4.1 e (4.2) respectivamente. A análise mostra uma redução cada vez maior quando consideramos mais pontos na discretização do eixo  $x$  para os métodos FDA–NCP e Crank–Nicolson com Newton.

Conseguiu-se resolver o modelo de combustão de oxigênio in situ (5.7) usando o algoritmo de complementaridade não linear FDA–NCP e este é comparado com o esquema de diferenças finitas de Crank–Nicolson com Newton, sendo as duas soluções muito próximas segundo são mostrados na Figura 5.3. Isto sugere que é possível aplicar este método a problemas parabólicos que podem ser reescritos como problema de complementaridade. O FDA–NCP mostra a vantagem de poder ser usado com menos pontos na discretização do espaço segundo pode-se observar na Figura 5.2, nesses casos o esquema de Crank–Nicolson com Newton da valores negativos para a temperatura. Com respeito ao erro relativo temos que as Tabelas 5.4 e 5.5 mostram uma boa evidência de uma convergência linear do algoritmo de complementaridade, o que é observado nas Figuras 5.4 e 5.5, as quais indicam um crescimento linear quando refinamos a malha para os dois métodos. A pesar

do crescimento linear do erro relativo, vemos que a diferença entre duas soluções decresce conforme refinamos a malha, isto é uma boa evidência de que ambos métodos convergem para a mesma solução. A diferença em tempo de processo computacional acrescenta-se quando refinamos a malha no espaço segundo mostram As Tabelas 5.2 e 5.3 em cada instante de tempo para o FDA–NCP e Crank–Nicolson com Newton, respectivamente.

Fizemos análise das ondas térmica e de combustível via solução de problema de Riemann, obtivemos a velocidade da onda térmica e comparamos com as simulações obtendo o erro menor que 8%.

# ***REFERÊNCIAS***

- [1] AHMED, S. A numerical method for oxygen diffusion and absorption in a sike cell. *Applied Mathematics and Computations*, v. 1, n. 173, p. 668–682, 2006.
- [2] BAIOCCHI, C.; POZZI, G. A. An evolution variational inequality related to a diffusion-absorption problem. *Applied Matemáticas and Optimization*, v. 2, n. 4, p. 304–314, 1976.
- [3] BIEZUNER, R. J. *Notas de Aula: Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Parciais Elípticas*. UFMG, Minas Gerais: Instituto de Ciências Exatas, 2007.
- [4] BOUCÍGUEZ, A. C.; LAZO, L. I.; VILLA, L. T. Evaluación de difusión–consumo de oxígeno en tejidos vivos con difusividad variable. *Mecánica Computacional*, XXIX, p. 2083–2093, 2010.
- [5] BOUREGHDA, A. Numerical solution of the oxygen diffusion in absorbing tissue with a moving boundary. *Communications in Numerical Methods in Engeneering*, v. 9, n. 22, p. 933–942, 2006.
- [6] BRESSAN, A. Hyperbolic systems of conservation laws. *Revista Matemática Complutense*, v. 12, n. 1, 1999.
- [7] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Numerical Analysis*. Ninth edition. Boston, USA: Brooks/Cole - CENGAGE Learning, 2010.
- [8] CHAPIRO, G. *Gas-Solid Combustion in Insulated Porous Media*. Tese (Doutorado em Matemática) — Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada, Rio de Janeiro, Brasil, 2009.
- [9] CHAPIRO, G.; MARCHESIN, D.; SHECTER, S. Combustion waves and Riemann solutions in light porous foam. *Submitted to JHDE*, 2013.
- [10] CHAPIRO, G.; MAZORCHE, S.; HERSKOVITS, J. Solution of the oxygen diffusion problem using nonlinear complementarity algorithm (fda-ncp). *XXX CILAMCE*, p. 8–11, 2009.
- [11] CHAPIRO, G.; MAZORCHE, S.; HERSKOVITS, J. Solution of a class of moving boundary problems with a nonlinear complementarity approach. *To be submitted to JOTA*, 2013.
- [12] CHAPIRO, G. et al. Solution of the nonlinear parabolic problem using nonlinear complementarity algorithm (fda-ncp). *Mecánica Computacional*, XXIX, n. 20, 2010.
- [13] CRANK, J.; GUPTA, R. S. A moving boundary problem arising from the diffusion of oxygen in absorbing tissue. *IMA, Journal de Applied Mathematics*, v. 10, n. 1, p. 19–33, 1972.

- [14] DUIJN, C. J. V. *An Introduction to Conservation Laws: Theory and Applications to Multi-Phase Flow*. Eindhoven University of Technology, The Netherlands, 2003.
- [15] FERRIS, M. C.; PANG, J. S. Engineering and economic applications of complementarity problems. *Society for Industrial and Applied Mathematics, SIAM*, v. 39, n. 4, 1997.
- [16] FORTUNA, A. d. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos. Conceitos Básicos e Aplicações*. USP, São Paulo: Edusp - Editora da Universidade de São Paulo, 2000.
- [17] LAX, P. D. Hyperbolic systems of conservations laws ii. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, X, p. 537–566, 1957.
- [18] LAX, P. D. *Hyperbolic Systems of Conservation Laws and the Mathematical Theory of Shock Waves*. Society For Industrial And Applied Mathematics, Philadelphia, 1973.
- [19] LAWRENCE C., E. *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 1997.
- [20] LEVEQUE, R. J. *Numerical methods for conservation laws*. Lectures in mathematics: ETH Zürich, 1992.
- [21] LIMA, E. L. *Curso de análise v.2*. 11ava. ed. IMPA, Rio de Janeiro: Projeto Euclides, 2010.
- [22] MAILYBAEV, A. et al. Analytical study of in-situ combustion in a wet porous media. *15 th European Symposium on Improved Oil Recovery*, Paris, 2009.
- [23] MAYERS, D.; MORTON, K. *Numerical Solution of Partial Differential Equations*. Cambridge, UK.: Cambridge University Press, 2005.
- [24] MAZORCHE, S. R. *Algoritmos para problemas de complementaridade não linear*. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) — Universidade Federal de Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2007.
- [25] MAZORCHE, S. R.; HERSKOVITS, J. A feasible directions algorithm for nonlinear complementarity problems and applications in mechanics. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, v. 37, p. 435–446, 2007.
- [26] PING, L. T. *Hyperbolic and Viscous Conservation Laws*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2000.
- [27] QUARTERONI, A.; SACCO, R.; SALERI, F. *Numerical Mathematics*. Springer-Verlag New York, Inc., p.281-284, 2000.
- [28] SERRE, D. *Systems of Conservation Laws 1. Hyperbolicity, Entropies, Shock Waves*. Cambridge University Press, 1999.
- [29] SMOLLER, J. *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*. 2da. ed. Springer Verlag, p.327, 1994.
- [30] STRIKWERDA, J. C. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Philadelphia, EE. UU.: Society for Industrial and Applied Mathematics, SIAM., 2004.

- [31] TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. W. J. Minkowycz and E. M. Sparrow, Editors, 1997.
- [32] TELLO, J. S. *Lições de Equações Diferenciais Ordinárias*. Instituto de Matemática Pura e Aplicada, Rio de Janeiro: Projeto Euclides, 1979.
- [33] THOMAS, J. *Numerical Partial Differential Equations. Conservation Laws and Elliptic Equations*. Springer-Verlag New York, Inc., 1999.
- [34] TORO, E. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. A Practical Introduction*. 3era. ed. Springer, Dordrecht, Heidelberg, London, New York, 2009.