

Universidade Federal de Juiz de Fora
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-Graduação em Matemática

Rosmery Violeta Quispe Zavala

**ONDAS VIAJANTES PARA COMBUSTÃO IN-SITU COM EFEITO DE
PERDAS TÉRMICAS EM MEIOS POROSOS**

Juiz de Fora

2018

Rosmery Violeta Quispe Zavala

**ONDAS VIAJANTES PARA COMBUSTÃO IN-SITU COM EFEITO DE
PERDAS TÉRMICAS EM MEIOS POROSOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal de Juiz de Fora, na área de concentração em Matemática, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática.

Orientador: Grigori Chapiro

Juiz de Fora

2018

Ficha catalográfica elaborada através do Modelo Latex do CDC da UFJF
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Quispe Zavala, Rosmery Violeta.

ONDAS VIAJANTES PARA COMBUSTÃO IN-SITU COM EFEITO
DE PERDAS TÉRMICAS EM MEIOS POROSOS / Rosmery Violeta
Quispe Zavala. – 2018.

82 f. : il.

Orientador: Grigori Chapiro

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto
de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Matemática, 2018.

1.Combustão. 2.Injeção de ar. 3.Meios porosos. 4.Perdas térmicas.
5.Ondas viajantes. I. Chapiro, Grigori orient. II. Título.

Rosmery Violeta Quispe Zavala

**ONDAS VIAJANTES PARA COMBUSTÃO IN-SITU COM EFEITO DE
PERDAS TÉRMICAS EM MEIOS POROSOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal de Juiz de Fora, na área de concentração em Matemática, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática.

Aprovada em:

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Grigori Chapiro - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Aparecido Jesuino de Souza
Universidade Federal da Paraíba

Prof. Dr. Laura Senos Lacerda Fernández
Universidade Federal de Juiz de Fora

Dedico este trabalho a meu pai Luciano Quispe, meu maior estímulo.

AGRADECIMENTOS

A Deus por me guiar e me prestar a seus anjos como eu chamo. Pessoas que me brindaram uma mão amiga sempre que precisava. O fato de saber que Deus me ama é imprescindível para me levantar diante qualquer obstáculo.

A minha família, meu estímulo para seguir em frente todos os dias, pela compreensão e pelo apoio incondicional. A minha mãe, mesmo que não esteja presente em corpo, que de alguma forma inexplicável intercede por mim em todo momento. A meu pai, meu maior exemplo de perseverança e dedicação, por acreditar sempre em mim e por suas contínuas orações. A todos meus irmãos Doris, Deysi, Lenin, Edil, Flor, Teo e Wilder por investir em mim e por suas palavras de conforto nos momentos de prostração, sem seu apoio seria impossível chegar até aqui.

A meu orientador Dr. Grigori Chapiro, por ter aceitado compartilhar comigo seu tempo e seus conhecimentos. Agradeço também por ter uma enorme paciência para me conduzir no desenvolvimento deste trabalho.

Aos professores Dr. Laura Senos e Dr. Aparecido Jesuino de Souza por aceitarem ser parte da banca examinadora e pelas sugestões cuidadosamente elaboradas para a melhora deste trabalho.

Aos professores que contribuíram no meu crescimento intelectual e pessoal, em especial, aos professores Dr. Olimpio Hiroshi Miyagaki, Dr. Alexei Deriglazov e Dr. Jose Barbosa, sempre dispostos a me aconselhar e a me ajudar.

A meus amigos Carlos Mamani e Manuel Argomedo que apesar da distância me apoiaram continuamente ao longo de todo o mestrado. A Carlos lito, Yvonne, Manuel, Irving, Yovani, Pablo, Nelson, Daniel, Giovana, Heber, Alex, Ednailton, Camilo, Jorge, Marcela, Aleman, Nathalia, Welington, Rafael, Cristina, Marcos, Alejandro, Santiago, Pavel, Amanda, Gracialiano e Angel pelas ideias e experiências compartilhadas neste processo. A Danilo, Jessica, Mariane, Italo, Rodrigo, Marcelo e Wiliam pela ajuda nas correções do português neste trabalho.

À Ismael Ledoino e demais autores de [27], pelo código implementado nesse trabalho que usamos para obter os exemplos numéricos do modelo mais geral apresentados neste trabalho. A Wesley da Silva Pereira por sua dissertação [31] que em grande parte usei como modelo para implementar a minha.

À secretária da pós-graduação, Paula, pela disponibilidade e atenção.

À FAPEMIG, pelo apoio financeiro, sem o qual este trabalho não seria possível.

“Um cientista digno de seu nome, principalmente um matemático, experimenta no seu trabalho a mesma sensação que um artista; o seu prazer é igualmente grande e da mesma natureza.”

Henri Poincaré.

RESUMO

Apresentamos um modelo para a injeção de ar em um meio poroso que contém combustível sólido levando em conta as perdas térmicas para rocha circundante. Em trabalhos anteriores, o modelo foi simplificado e todas as sequências de ondas para a solução de problemas de Riemann foram obtidas sem levar em conta as perdas térmicas. Nesse trabalho, é feito um primeiro passo para entender o efeito das perdas de calor, que são importantes especialmente em experimentos de laboratório. Para provar a existência e unicidade da solução de ondas viajantes, os efeitos de difusão e a dependência da densidade do gás na temperatura são desconsiderados. Também são apresentadas simulações numéricas que validam os resultados obtidos, bem como simulações numéricas para um sistema mais geral que considera termos difusivos. Por fim são comparadas as soluções numéricas para ambos sistemas e um exemplo numérico com valores típicos dos parâmetros para um modelo de combustão é apresentado.

Palavras-chave: Combustão. Injeção de ar. Meios porosos. Perdas térmicas. Ondas viajantes.

ABSTRACT

We present a model for the injection of air into an underground porous medium that contains a solid fuel. In previous works the model was simplified and all wave sequences for the Riemann problem solution were obtained without taking into account thermal losses to the surrounding rock. In that work the first step was made to understand the effect of heat losses, which are important especially in laboratory experiments. In order to prove of the existence and uniqueness of the traveling wave solution, diffusion effects and the dependence of gas density on temperature were disregarded. We will also present numerical simulations that validate the results obtained, as well as numerical simulations for a more general system that considers diffusive terms. Furthermore, we will compare the numerical solutions for both systems and a numerical example with typical values of the parameters for a combustion model is presented.

Key-words: Combustion. Injection of air. Porous media. Thermal losses. Traveling waves.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 –	Curvas características do PVI (2.5),(2.7) para $n = 1$ e F uniformemente convexa de classe C^2	21
Figura 2 –	Todas as seqüências de ondas possíveis para ondas de combustão com velocidade positiva e que satisfazem as condições seguintes: (1) o estado à esquerda é do tipo TC , FC ou OC ; (2) aumento da velocidade da onda; (3) seqüências estendidas o mais longe possível.	29
Figura 3 –	A condição inicial é plotada na esquerda e a simulação no tempo 400 na direita com $a = 5$. Ambas figuras correspondem à seqüência $FC \xrightarrow{c_s} OC \xrightarrow{a} OC \xrightarrow{c_f} TC$	29
Figura 4 –	Todas as seqüências de ondas possíveis para ondas de combustão com (1) o estado à esquerda é do tipo TC , FC ou OC , (2) aumento da velocidade da onda, (3) seqüências estendidas o mais longe possível.	30
Figura 5 –	A condição inicial é plotada na esquerda e a simulação no tempo 800 na direita. Ambas figuras correspondem à seqüência $TC \xrightarrow{c_c} FC \xrightarrow{c_s} OC \xrightarrow{a} OC \xrightarrow{c_f} OC$	31
Figura 6 –	Leque de Riemann para o Sistema (5.1)-(5.3) representando os estados constantes no espaço (θ, Y, ρ) separados: (esquerda) pela onda de combustível, onda térmica e onda de gás supondo que estas ondas existem; (direita) pela onda de combustível e de gás.	41
Figura 7 –	Leque de Riemann para o Sistema (4.12)-(4.15) representando os estados constantes no espaço (θ, Y, ρ) separados pelas ondas: (esquerda) de combustível estacionária, de combustão com velocidade $v < v_Y$ e de concentração do gás com velocidade v_Y ; (centro) de combustão e de concentração do gás; (direita) de combustão.	42
Figura 8 –	Caso 1: f é estritamente crescente.	44
Figura 9 –	Caso 2: f tem um ponto de inflexão, θ_i . $f(\theta_M) = 1/4$	44
Figura 10 –	Caso 3: f tem dois pontos críticos. θ^c pontos críticos de f	44
Figura 11 –	Caso 1: Curva Γ para ρ_+ é estritamente crescente.	45
Figura 12 –	Caso 2: Curva Γ se f tem um ponto de inflexão.	45
Figura 13 –	Caso 3: Curva Γ se f tem dois pontos críticos.	45
Figura 14 –	Representações da curva Γ	46
Figura 15 –	Retrato de fase do Sistema (5.18)-(5.19) para $v < v_\theta$ com os equilíbrios e cada uma das 4 formas de Γ descritas na Subseção 5.2.1.	52
Figura 16 –	Retrato de fase do Sistema (5.18)-(5.19) para $v > v_\theta$ com os equilíbrios e cada uma das 4 formas de Γ descritas na Subseção 5.2.1.	52
Figura 17 –	Retrato de fase do Sistema (5.20)-(5.21) para $v = v_\theta$ com os equilíbrios e a 1^a , 2^a e 4^a das formas de Γ obtidas na Subseção 5.2.1.	53

Figura 18 – Combustão lenta ($v < v_\theta$): (esquerda) Curva Γ e órbita do sistema de EDOs (5.16)-(5.17); (direita) Vizinhança do eixo $\theta = 0$ ampliada.	57
Figura 19 – Combustão rápida ($v > v_\theta$): (esquerda) Curva Γ e órbita do sistema de EDOs (5.16)-(5.17); (direita) Vizinhança do eixo $\theta = 0$ ampliada.	58
Figura 20 – Combustão de ressonância ($v = v_\theta$): (esquerda) Curva Γ e órbita do sistema de EDOs (5.16)-(5.17) coincidentes; (direita) Vizinhança do eixo $\theta = 0$ ampliada.	59
Figura 21 – Onda de combustão lenta ($v < v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão.	61
Figura 22 – Combustão lenta ($v < v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão conforme varia λ_θ	62
Figura 23 – Combustão rápida ($v > v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão.	63
Figura 24 – Combustão rápida ($v > v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão conforme varia λ_θ	64
Figura 25 – Combustão de ressonância ($v = v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão.	65
Figura 26 – Combustão ressonância ($v = v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão conforme varia λ_θ	66
Figura 27 – Onda de combustão lenta ($v < v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão, para $\Delta x = 1$, $\Delta t = 5$	68
Figura 28 – Onda de combustão lenta ($v < v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do Sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão térmica conforme a partição é refinada.	69
Figura 29 – Combustão rápida ($v > v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão, para $\Delta x = 1$, $\Delta t = 5$	70
Figura 30 – Onda de combustão rápida ($v > v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do Sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão térmica conforme a partição é refinada.	71

Figura 31 – Combustão de ressonância ($v = v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão, para $\Delta x = 1$, $\Delta t = 5$	72
Figura 32 – Onda de combustão ressonância($v = v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do Sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão térmica conforme a partição é refinada.	73
Figura 33 – Solução do Sistema (4.7)-(4.9) no retrato de fase (ρ, θ) usando os valores dos parâmetros da Tabela 1.	78

LISTA DE SÍMBOLOS

$\Delta \subset \mathbb{R}^n$	Subconjunto aberto de \mathbb{R}^n .
$u^L = u^-$	Estado esquerdo.
$u^R = u^+$	Estado direito.
$u^L \xrightarrow{v} u^R$	Onda de velocidade v que liga u^L à esquerda a u^R à direita.
TC	Equilíbrio onde a combustão termina para baixas temperatura.
FC	Equilíbrio onde a combustão termina por falta de combustível.
OC	Equilíbrio onde a combustão termina por falta de oxigênio.
Γ	Curva onde a componente vertical do campo vetorial do Sistema (5.16)-(5.17) é zero.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	16
2.1	TEOREMA DA VARIEDADE ESTÁVEL	16
2.2	ONDAS VIAJANTES	17
2.3	LEIS DE CONSERVAÇÃO	19
2.3.1	Ondas de choque e Curvas de Hugoniot	21
2.3.2	Ondas de contato	22
2.3.3	Ondas de rarefação	24
3	REVISÃO DE TRABALHOS ANTERIORES	25
3.1	SOLUÇÕES DE PROBLEMAS DE RIEMANN PARA COMBUSTÃO EM ESPUMA POROSA LEVE	25
3.1.1	Ondas de combustão e soluções de problemas de Riemann em espuma porosa leve	27
3.1.2	Soluções de Problemas de Riemann para combustão contra- fluxo em espuma porosa leve	30
3.2	FRENTES DE COMBUSTÃO SEM GÁS COM PERDAS TÉRMICAS	31
4	MODELO PARA COMBUSTÃO COM PERDA TÉRMICA .	35
4.1	ADIMENSIONALIZAÇÃO DO MODELO	36
4.2	MODELO ADIMENSIONAL SIMPLIFICADO	37
5	EXISTÊNCIA E UNICIDADE DE ONDAS VIAJANTES . .	39
5.1	ONDAS DA PARTE HIPERBÓLICA DO MODELO	39
5.2	ONDAS DE COMBUSTÃO	42
5.2.1	Curva Γ	43
5.2.2	Demonstração da existência das ondas de combustão	47
6	SIMULAÇÕES NUMÉRICAS	55
6.1	VALIDAÇÃO DA TEORIA	56
6.2	COMPARAÇÃO DAS SOLUÇÕES	60
6.2.1	Análise da difusão térmica	60
6.2.1.1	<i>Onda de combustão lenta</i>	61
6.2.1.2	<i>Onda de combustão rápida</i>	63
6.2.1.3	<i>Onda de combustão de ressonância</i>	65
6.2.2	Refinamento da partição	67

6.2.2.1	<i>Onda de combustão lenta</i>	67
6.2.2.2	<i>Onda de combustão rápida</i>	70
6.2.2.3	<i>Onda de combustão de ressonância</i>	72
6.3	APLICAÇÃO DA TEORIA	73
7	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	79
	REFERÊNCIAS	80

1 INTRODUÇÃO

Combustão in-situ é uma técnica térmica eficiente e uma das mais importantes de recuperação avançada de óleo (EOR). Nesse processo é injetado um fluido (como oxigênio puro ou ar) que reage com as componentes mais pesadas do óleo presente em reservatórios de rochas porosas gerando calor que diminui a viscosidade do óleo e, por consequência, é obtido um raio de mobilidade mais favorável, estimulando o fluxo em direção aos poços de produção. Para mais detalhes veja [25, 33].

A injeção de ar com combustão in-situ em um meio poroso que contém combustível sólido oferece várias vantagens que podem incluir uma produção de óleo mais rápida, custos operacionais reduzidos e um menor impacto ambiental se comparado com outras técnicas de EOR. A engenharia do processo é mais difícil do que qualquer outro método de recuperação de óleo bruto, porém as vantagens da combustão in-situ motivam os pesquisadores a investigá-lo. Além de outras dificuldades relacionadas à engenharia e modelagem química, a solução das equações para esses modelos é um desafio matemático, veja [33].

Este trabalho é motivado por um modelo de injeção de ar em um meio poroso que contém óleo tão viscoso que pode ser considerado um combustível sólido. O modelo foi proposto em [1], onde os autores analisaram a estrutura de combustão in-situ direta usando métodos de análise assintótica. Este modelo também foi estudado sob algumas simplificações em [10, 13, 7]. Existem poucos trabalhos que estudaram este modelo considerando perdas térmicas, por exemplo [29, 28, 18]. Em [6, 8, 9, 11] as perdas térmicas foram omitidas e considerada uma lei de Arrhenius truncada, além de negligenciar a capacidade térmica do meio comparada com a do ar. Uma consequência é que o oxigênio e o calor foram ambos transportados à velocidade do gás em movimento.

Neste trabalho vamos seguir as ideias de [5], onde foi considerado o efeito das perdas térmicas, a lei de Arrhenius correta (que permite a reação química ocorrer para qualquer temperatura) e a velocidade térmica diferente da do gás. Estes aspectos tornam este modelo mais real do que o modelo apresentado em [6]. Dado que a hipótese da capacidade térmica (i.e., a capacidade térmica do meio é desprezível comparada com a do ar) não é correta para a recuperação do óleo e para muitas outras aplicações. Para complementar, vamos incluir algumas simulações numéricas considerando a condutividade térmica do meio.

As ondas de combustão estudadas neste trabalho têm sido chamadas “reaction-trailing smolder waves” [36] ou “coflow (or forward) filtration combustion wave” [2] no contexto de modelos mais realistas de injeção de ar em um meio poroso. O movimento do gás tras oxigênio para dentro da região onde o combustível sólido está presente.

Para modelos unidimensionais, existem dois tipos possíveis de movimento da onda

de combustão: na combustão co-fluxo, a ignição ocorre no poço de injeção e se propaga na mesma direção do gás injetado, por exemplo [6, 9]; e a segunda possibilidade é a combustão contra-fluxo, para a qual a ignição ocorre no poço de produção e a onda de combustão se move na direção oposta à do gás injetado. Podemos encontrar mais detalhes sobre combustão contra-fluxo em [35, 11, 8]. Nos modelos estudados ao longo deste trabalho a lei de Arrhenius correta é considerada, o que implica que a combustão contra-fluxo não é possível para estes modelos. Com isso, podemos desprezar a possibilidade de zerar a taxa de reação para baixas temperaturas, obtendo assim que a taxa de reação pode ser nula apenas por falta de combustível ou por falta de oxigênio. Supondo injeção à esquerda, seguindo [11] temos que, como a onda se move em direção oposta ao fluxo do ar (ou oxigênio), é impossível que a combustão termine à esquerda (poço de injeção) por falta de oxigênio; ou que a combustão termine à direita (poço de produção) por falta de combustível.

Este trabalho está organizado da seguinte forma. Seguindo o Capítulo de introdução, no Capítulo 2 apresentamos o Teorema da Variedade Estável e uma revisão da teoria de ondas viajantes e de leis de conservação. No Capítulo 3, fazemos uma breve revisão de trabalhos anteriores nos quais foi provada a existência e unicidade de ondas viajantes para modelos de combustão usando retrato de fase e teoria de perturbação. No Capítulo 4, derivamos e descrevemos um modelo para a combustão que consiste em três leis de balanço para energia, oxigênio e combustível. Usamos uma taxa de reação descrita pela lei de Arrhenius combinada com a lei de Ação de Massas, veja [12]. No Capítulo 5, formulamos o resultado principal e apresentamos as provas rigorosas sobre a existência e unicidade das ondas de combustão viajantes. No Capítulo 6, apresentamos alguns exemplos numéricos usando dados arbitrários que mostram o retrato de fase da onda viajante para os casos estudados no capítulo anterior e comparamos a solução do sistema de EDOs associado ao modelo que não considera a difusão, com a solução do sistema de EDPs associado ao modelo que considera a difusão. Além disso, um exemplo numérico com valores típicos dos parâmetros para um modelo de combustão é apresentado. As soluções numéricas para o sistema de EDOs e de EDPs são obtidas pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem e pelo método de Crank-Nicolson, respectivamente. Finalmente, no Capítulo 7 são discutidas algumas conclusões.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo apresentamos os principais conceitos e resultados relativos ao Teorema da Variedade Estável, à teoria de ondas viajantes e de leis de conservação que serão necessários para o desenvolvimento deste trabalho. Muitas demonstrações serão omitidas por se tratarem de resultados conhecidos, mas citaremos referências onde podem ser encontrados tais resultados, junto com suas demonstrações.

2.1 TEOREMA DA VARIEDADE ESTÁVEL

Nesta seção apresentaremos alguns conceitos fundamentais da Teoria de Equações Diferenciais Ordinárias abordados no Teorema da Variedade Estável e no decorrer deste trabalho. Também enunciaremos este teorema que será usado para garantir a existência das ondas viajantes na prova do teorema principal do Capítulo 5. Para mais detalhes veja [38, 32].

Daqui para frente, Δ é um subconjunto aberto de \mathbb{R}^n .

Consideremos uma equação diferencial ordinária (EDO) autônoma de primeira ordem denotada abreviadamente por:

$$x' = f(x), \quad (2.1)$$

com campo vetorial $f : \Delta \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ de classe C^k , $1 \leq k \leq \infty$, isto é, $f : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^n$ é uma aplicação de classe C^k .

Uma função diferencial $\mathcal{X} : I \rightarrow \mathbb{R}^n$ é uma *solução para a Equação (2.1) no intervalo* I se satisfaz as seguintes condições:

- i) A imagem de I por \mathcal{X} , isto é, $\{\mathcal{X}(t); t \in I\}$ está contido em Δ , e
- ii) $\frac{d\mathcal{X}}{dt}(t) = f(\mathcal{X}(t))$, para todo $t \in I$.

Dizemos que $x \in \Delta$ é um *ponto singular* (ou equilíbrio) do campo f se $f(x) = 0$ e *ponto não singular* (ou regular) se $f(x) \neq 0$.

Sejam $\varphi_1 : D_1 \subset \mathbb{R} \times \Delta_1 \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $\varphi_2 : D_2 \subset \mathbb{R} \times \Delta_2 \rightarrow \mathbb{R}^n$ os fluxos gerados pelos campos $f_1 : \Delta_1 \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $f_2 : \Delta_2 \rightarrow \mathbb{R}^n$ respectivamente. Diz-se que f_1 é *topologicamente conjugado* a f_2 quando existe um homeomorfismo $h : \Delta_1 \rightarrow \Delta_2$ tal que: $h(\varphi_1(t, x)) = \varphi_2(t, h(x))$ para todo $(t, x) \in D_1$.

Seja um campo vetorial $f : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^n$ de classe C^r , $r \geq 1$, um ponto $p \in \Delta$, chama-se *hiperbólico* se todos os autovalores de $Df(p)$ (matriz jacobiana do campo f em p) têm parte real diferente de zero.

Observação 2.1. *Pode-se ver que esta definição não depende da conjugação local de classe C^2 (i.e., uma conjugação topológica leva pontos singulares hiperbólicos em pontos singulares hiperbólicos).*

Um conjunto $S \subset \Delta$ chama-se *conjunto invariante* pelo campo $f : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^n$, se para cada $x \in S$ tem-se que $\varphi(t, x) \in S$ para todo $t \in \mathbb{R}$, onde φ denota o fluxo de f .

Seja o conjunto $E_S^s = E_S^s(f) = \{x \in \Delta; \varphi(t, x) \rightarrow S \text{ quando } t \rightarrow \infty\}$, ou seja $d(\varphi(t, x), S) \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$ (d métrica em \mathbb{R}^n). E_S^s chama-se *conjunto estável* de S . Analogamente, define-se $E_S^u = E_S^u(f)$ o *conjunto instável* de S , tomando $t \rightarrow -\infty$.

Teorema 2.1 (Teorema da Variedade Estável).

Hipóteses:

Seja $f \in C^1(\Delta)$ e φ_t o fluxo do sistema não linear (2.1). Suponha que existe x_0 ponto de equilíbrio hiperbólico com $Df(x_0) = CBC^{-1}$ em que

$$B = \begin{pmatrix} P & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix},$$

sendo P matriz $k \times k$ com autovalores com parte real negativa e Q matriz $(n - k) \times (n - k)$ com autovalores com parte real positiva.

Sejam $E^s \subset \mathbb{R}^n$ o espaço invariante estável e $E^u \subset \mathbb{R}^n$ o espaço invariante instável do campo f tais que $\dim E^s = k$ e $\dim E^u = n - k$.

Teses:

1. Existe uma vizinhança de x_0 tal que nessa vizinhança existe uma superfície de classe C^1 \mathcal{S} (estável) invariante pelo fluxo tal que $\lim_{t \rightarrow +\infty} \varphi(t, x) = x_0, \forall x \in \mathcal{S}$. Além disso, \mathcal{S} é tangente à E^s .
2. Existe uma superfície de classe C^1 \mathcal{U} (instável) invariante pelo fluxo tal que $\lim_{t \rightarrow -\infty} \varphi(t, x) = x_0, \forall x \in \mathcal{U}$. Além disso, \mathcal{U} é tangente à E^u .

Demonstração. A demonstração deste teorema pode ser encontrada em [32].

Observação 2.2. Na demonstração do Teorema da Variedade Estável dada em [32], são obtidas a unicidade da superfície \mathcal{S} (estável) e da superfície \mathcal{U} (instável) na respectiva vizinhança onde existem.

2.2 ONDAS VIAJANTES

Ondas viajantes são soluções de EDPs de evolução que possuem um perfil que é transportado no tempo à velocidade constante. Estas ondas aparecem em diversos problemas físicos, como referência podemos ver [42, 19], onde tem-se vários exemplos

desenvolvidos. Também existem outros artigos que aplicam essa teoria em problemas específicos [10, 9]. No Capítulo 5, aplicaremos a teoria de ondas viajantes no modelo de combustão in-situ.

Definição 2.1 (Solução na forma de onda viajante [42]). *Consideremos primeiro uma equação diferencial parcial (EDP) que envolve duas variáveis $x \in \mathbb{R}$, $t \in \mathbb{R}$. Uma solução da forma*

$$u(x, t) = w(\xi, t), \quad x \in \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}, \quad \xi = x - vt \quad (2.2)$$

é chamada uma onda viajante (com $\partial_t w(\xi, t) = 0$, velocidade v e perfil w).

Uma onda viajante é caracterizada geometricamente, como uma onda que se move com velocidade constante v mantendo o perfil, ao longo da variável espacial x .

Seguindo [22], dizemos que uma solução $u(t)$ da Equação (2.1) é uma *órbita heteroclínica* se $u(t) \rightarrow u^\pm$ conforme $t \rightarrow \pm\infty$, isto é, a solução $u(t)$ liga dois equilíbrios, u^+ e u^- com $u^+ \neq u^-$. Se $u^+ = u^-$, dizemos que $u(t)$ é uma *órbita homoclínica* (assumindo tacitamente que $u(t)$ não é a própria solução de equilíbrio).

A ideia básica para se encontrar uma solução na forma de onda viajante consiste em definir a variável $\xi = x - vt$, chamada de variável viajante, e transformar o sistema de EDPs em um sistema de EDOs. Por exemplo, procurar uma solução na forma de uma onda viajante para o sistema Convecção-Difusão-Reação

$$\partial_t u(x, t) + \partial_x u(x, t) = \partial_{xx} u(x, t) + c(u(x, t)), \quad (2.3)$$

consiste em encontrar w que satisfaz

$$-v w_\xi + w_\xi = w_{\xi\xi} + c w. \quad (2.4)$$

Definição 2.2. *Uma solução Frente de Onda da Equação (2.3) é um tipo particular de solução em forma de onda viajante que é definida para todo ξ , monótona e tal que w conecta dois pontos de equilíbrio da equação, veja [19].*

Em geral, para a classe de equações diferenciais parciais consideradas, a equação diferencial ordinária (2.4) não tem solução clássica, conforme [42, 19].

Para que esteja bem definida, a frente de onda deve ser uma onda heteroclínica. Além disso, os limites para as derivadas de w são:

$$\lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} w_\xi(\xi, t) = \lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} w_{\xi\xi}(\xi, t) = 0.$$

2.3 LEIS DE CONSERVAÇÃO

Usaremos resultados desta seção na demonstração da existência das sequências de ondas no Capítulo 5. Para maiores detalhes sobre os resultados apresentados nesta seção consulte [34, 14, 40].

Uma lei de conservação tipicamente afirma que quando não há produção ou consumo, a variação de uma quantidade conservada em um domínio fixo é igual ao fluxo de entrada menos o fluxo de saída no domínio, veja [34, 14]. Tal lei de conservação pode ser expressada matematicamente como a seguinte equação diferencial parcial de evolução

$$u_t + (F(u))_x = 0, \quad (2.5)$$

onde a função vetorial $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n$ representa as quantidades a serem conservadas, tais como massa, momento e energia, e a função $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é chamada função de fluxo, onde cada uma de suas componentes representa o fluxo da quantidade associada [34].

Seguindo [40, 34], consideramos a Equação (2.5) como sendo *estritamente hiperbólica*, ou seja, tal que em cada ponto $F'(u)$ tem autovalores reais distintos $\lambda_1(u) < \dots < \lambda_n(u)$. Considere a base de autovetores $\{r_k(u)\}_{k=1}^n$, onde cada par $(\lambda_k(u), r_k(u))$ é um par autovalor-autovetor para $F'(u)$. Os autovalores e autovetores do sistema são chamados de *velocidades características* e *vetores característicos* do sistema, respectivamente. O termo “*k-família*”, $1 \leq k \leq n$, faz referência ao k -ésimo par autovalor-autovetor na ordem estabelecida neste parágrafo.

Um problema envolvendo leis de conservação geralmente possui condições iniciais e, quando o domínio espacial é limitado, condições de fronteira. *O Problema de Cauchy* é um tipo clássico de problema de valor inicial (PVI) no qual

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad \text{para } -\infty < x < \infty. \quad (2.6)$$

Neste caso, u_0 é a condição inicial para a solução u do problema. Um caso particular do problema de Cauchy muito utilizado na teoria de leis de conservação e no desenvolvimento de métodos numéricos, é o chamado *Problema de Riemann*, no qual a condição inicial é da forma

$$u_0(x) = \begin{cases} u^L & \text{se } x < 0, \\ u^R & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad (2.7)$$

onde os vetores constantes u^L e u^R são os estados extremos à esquerda e à direita, respectivamente.

Conforme [34], para o PVI (2.5)-(2.6) definimos como *curva característica da k-família* a curva parametrizada $(t, x(t))$ que satisfaz o PVI

$$x'(t) = \lambda_k(u(x(t), t)), \quad t > 0 \quad (2.8)$$

$$x(0) = x_0, \quad (2.9)$$

para algum x_0 .

Em geral, problemas envolvendo leis de conservação podem apresentar soluções não regulares, por exemplo descontínuas [40]. Esta situação pode ocorrer mesmo com condições iniciais suaves. Uma solução de classe C^1 que atende à Equação (2.5) é dita *solução forte (clássica)*. Para os casos onde não é possível obter uma solução forte pode-se admitir uma solução generalizada.

Seguindo [34], dizemos que u é uma *solução generalizada (fraca)* da lei de conservação (2.5)-(2.7), se ela satisfaz

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [u \phi_t + F(u) \phi_x] dx dt + \int_{-\infty}^\infty u_0(x) \phi(x, 0) dx = 0, \quad (2.10)$$

para toda $\phi \in C^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))$ com suporte compacto.

Vale ressaltar que, geralmente, a solução fraca de um problema de Leis de Conservação não é única, sendo necessária a utilização de critérios adicionais para encontrar soluções fisicamente relevantes.

Uma maneira de se encontrar uma solução fisicamente relevante é adicionar uma pequena difusão na lei de conservação (2.5), o que resulta na chamada forma viscosa

$$u_t + (F(u))_x = \epsilon u_{xx}; \quad (2.11)$$

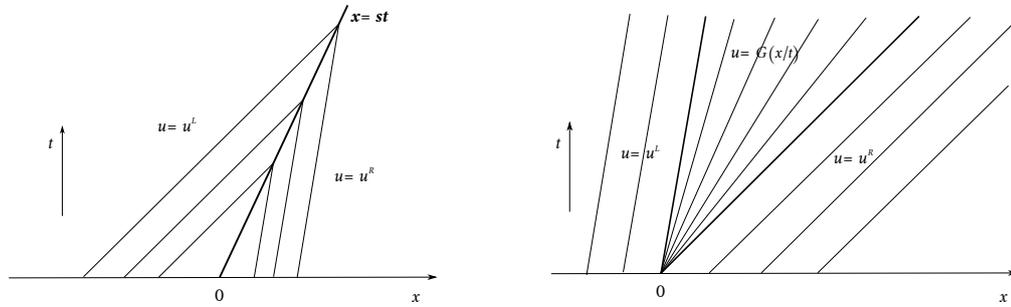
onde ϵ é uma constante positiva. Uma solução desta equação é conhecida como *perfil viscoso* e denotada por u^ϵ [34]. A forma viscosa possui melhores resultados de existência e unicidade que a forma invíscida, além de suas soluções serem suaves. As soluções fisicamente relevantes da lei de conservação (2.5) são definidas pelo seguinte limite

$$u = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} u^\epsilon. \quad (2.12)$$

Encontrar esta solução limite não é uma tarefa simples de ser realizada e, portanto, outras condições são utilizadas para se obter soluções relevantes. Estas condições são usualmente chamadas de condições de entropia, explicadas em detalhes a seguir, e por isso as soluções que satisfazem a Equação (2.12) são chamadas de *soluções entrópicas*, veja também [14].

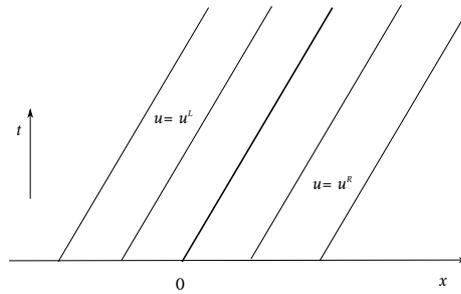
Uma das principais características do problema de Riemann é que suas soluções são descritas por sequências de ondas, veja [37]. Por exemplo, em [14, 37] o autor considerando o PVI (2.5),(2.7) para $n = 1$ e F uniformemente convexa de classe C^2 , mostra que essas ondas podem ser definidas segundo a disposição das curvas características entre os estados extremos. Neste caso, as *ondas de choque* ocorrem quando as curvas características se intersectam conforme a Figura 1(a), sendo que os estados extremos são ligados por uma descontinuidade que se move com velocidade s constante. As *ondas de rarefação* surgem quando as curvas características se afastam umas das outras conforme a Figura 1(b), ou seja, a velocidade de u^R é maior que a velocidade de u^L e os dois estados são

conectados por uma curva suave. As *ondas de contato* ou *descontinuidades de contato* são descontinuidades que se movem com velocidade constante, assim como os choques sendo, porém, as características paralelas à curva de descontinuidade conforme a Figura 1(c).



(a) Onda de choque: $u^L > u^R$.

(b) Onda de rarefação: $u^L < u^R$.



(c) Onda de contato: descontinuidade com velocidade $F'(u) = \text{const. } \forall u$.

Figura 1 – Curvas características do PVI (2.5),(2.7) para $n = 1$ e F uniformemente convexa de classe C^2 .

2.3.1 Ondas de choque e Curvas de Hugoniot

Considere a seguinte proposição

Proposição 2.1. *Uma descontinuidade (u^L, u^R) na solução do problema de Riemann de uma lei de conservação deve satisfazer a condição*

$$F(u^L) - F(u^R) = s(u^L - u^R), \quad (2.13)$$

para alguma velocidade s . Esta condição é conhecida como condição de Rankine-Hugoniot.

Demonstração. A demonstração desta proposição pode ser encontrada em [37, 34].

Suponha que, fixado um estado \hat{u} (à esquerda ou à direita), deseja-se encontrar o conjunto de estados que pode ser conectados à \hat{u} através de uma descontinuidade, ou

seja, que satisfaz a Equação (2.13). Tal problema resulta em um sistema com n equações e $n + 1$ incógnitas, já que a velocidade s também é desconhecida. Portanto, são esperados conjuntos de soluções a um parâmetro. Para F suficientemente suave, foi provado em [26, 37] que estes conjuntos, representam n -ramos de curvas que se encontram em \hat{u} . Estes ramos admitem parametrizações diferenciáveis e a função s sobre os mesmos também é diferenciável. A análise que segue, considera este caso particular.

Seja \tilde{u}_k uma parametrização de um dos n -ramos de pontos que satisfazem a Equação (2.13) tal que $\tilde{u}_k(0) = \hat{u}$. Se $s_k(\xi)$ é a função velocidade para cada ponto deste ramo, a condição de Rankine-Hugoniot se transforma em

$$F(\tilde{u}_k(\xi)) - F(\hat{u}) = s_k(\xi) (\tilde{u}_k - \hat{u}). \quad (2.14)$$

Ao avaliar a derivada da expressão acima no ponto $\xi = 0$, obtêm-se

$$F'(\hat{u})(\tilde{u}'_k(0)) = s_k(0) \tilde{u}'_k(0), \quad (2.15)$$

de tal forma que o autovetor $r_k(\hat{u})$ é tangente ao ramo de curva parametrizado por \tilde{u}_k em $\xi = 0$, sendo este ramo associado à k -família. Além disso, $s_k(0) = \lambda_k(\hat{u})$.

O conjunto dos ramos é denominado de curva de Hugoniot do ponto \hat{u} . Todo ponto pertencente à curva de Hugoniot pode ser conectado ao ponto \hat{u} através de um choque.

Apesar da curva de Hugoniot fornecer todos os estados atingíveis a partir de um estado fixo, somente parte destes resultam em soluções entrópicas. Para apresentar as condições de entropia propostas em [26] a seguinte definição é necessária.

Definição 2.3. *O k -ésimo campo de autovalores característicos é dito genuinamente não linear [37], se*

$$\nabla \lambda_k(u) r_k(u) \neq 0, \quad \forall u. \quad (2.16)$$

Em outras palavras, um campo λ_k é genuinamente não linear se a função λ_k é monótona crescente ou decrescente sobre qualquer curva integral do campo vetorial r_k .

Definição 2.4 (Condições de entropia segundo Lax [26]). *Se o k -ésimo campo de autovalores característicos é genuinamente não linear, uma descontinuidade (u^L, u^R) é admissível segundo Lax se satisfaz*

$$\lambda_{k-1}(u^L) < s < \lambda_k(u^L), \quad \lambda_k(u^R) < s < \lambda_{k+1}(u^R), \quad (2.17)$$

onde s é a velocidade da descontinuidade.

2.3.2 Ondas de contato

Em [34], uma condição de entropia que trata de descontinuidades de contato foi apresentada. Para tanto, uma outra definição é necessária.

Definição 2.5. *O k -ésimo campo de autovalores característicos é dito linearmente degenerado se*

$$\nabla \lambda_k(u) r_k(u) = 0, \quad \forall u. \quad (2.18)$$

Em outras palavras, um campo λ_k é linearmente degenerado se a função é constante sobre qualquer curva integral do campo vetorial r_k . O seguinte resultado é válido.

Teorema 2.2. *Seja o k -ésimo campo de velocidades características, linearmente degenerado. Se u^L e u^R pertencem à mesma curva integral de r_k , então estes estados são conectados por uma descontinuidade com velocidade $s = \lambda_k(u^L) = \lambda_k(u^R)$.*

Demonstração. Suponha que u^L e u^R pertençam à mesma curva integral de r_k . Tome uma parametrização $\tilde{u}_k(\xi)$ desta curva. Então derivando $F(\tilde{u}_k(\xi))$ obtemos

$$F'(\tilde{u}_k(\xi)) \tilde{u}'_k(\xi) = \lambda_k(\tilde{u}_k(\xi)) \tilde{u}'_k(\xi), \text{ ou seja, } (F \circ \tilde{u}_k)'(\xi) = \lambda_k(\tilde{u}_k(\xi)) \tilde{u}'_k(\xi). \quad (2.19)$$

Aplicando o Teorema Fundamental do Cálculo no intervalo $[0, 1]$ obtêm-se

$$F(u^R) - F(u^L) = (F \circ \tilde{u}_k)(\xi) \Big|_0^1 = \int_0^1 \lambda_k(\tilde{u}_k(\xi)) \tilde{u}'_k(\xi) d\xi. \quad (2.20)$$

Como o k -ésimo campo de velocidades características é linearmente degenerado, então λ_k é constante ao longo da curva integral. Portanto, sendo $s = \lambda_k(u^L)$ e aplicando novamente o Teorema Fundamental do Cálculo, obtêm-se

$$F(u^R) - F(u^L) = s \int_0^1 \tilde{u}'_k(\xi) d\xi = s(u^R - u^L). \quad (2.21)$$

Como u^L e u^R satisfazem a condição de Rankine-Hugoniot utilizando $s = \lambda_k(u^L)$, então estes podem ser conectados por uma descontinuidade que se move com velocidade s . \square

Uma descontinuidade neste tipo de campo é chamada de *descontinuidade de contato*, caracterizada pelo fato das curvas características de cada lado da curva de descontinuidade serem paralelas.

A condição de entropia de Lax [34] é modificada na definição que segue.

Definição 2.6 (Condições de entropia segundo Lax [34, 26]). *Se o k -ésimo campo de autovalores característicos é genuinamente não linear ou linearmente degenerado, uma descontinuidade (u^L, u^R) é admissível segundo Lax se satisfaz*

$$\lambda_{k-1}(u^L) \leq s \leq \lambda_k(u^L), \quad \lambda_k(u^R) \leq s \leq \lambda_{k+1}(u^R), \quad (2.22)$$

onde s é a velocidade da descontinuidade.

2.3.3 Ondas de rarefação

Uma *onda de rarefação* é uma função contínua da forma

$$u(x, t) = \begin{cases} u^L, & \text{se } x \leq \xi_1 t, \\ G(x/t), & \text{se } \xi_1 t \leq x \leq \xi_2 t, \\ u^R, & \text{se } x \geq \xi_2 t, \end{cases} \quad x \in \mathbb{R}, t > 0 \quad (2.23)$$

para algum par (ξ_1, ξ_2) tal que $\xi_1 < \xi_2$.

A função G caracteriza a onda e deve ser determinada para cada tipo de equação. Novamente, suponha F suficientemente suave para os cálculos seguintes. Ao derivar G no tempo e espaço, e substituir o resultado na lei de conservação (2.5), obtém-se

$$-\frac{x}{t^2} G'(x/t) + \frac{1}{t} F'(G(x/t)) G'(x/t) = 0. \quad (2.24)$$

Reorganizando os termos e denotando $\xi = x/t$, obtém-se $F'(G(\xi)) G'(\xi) = \xi G'(\xi)$.

Como é esperado que a função G seja suave e conecte os dois extremos do salto, assume-se que $G'(\xi) \neq 0$, ou seja, $G'(\xi)$ é proporcional a algum autovetor $r_k(G(\xi))$. Como os autovetores são linearmente independentes, $G'(\xi)$ deve ser proporcional a apenas um dos n autovetores, de modo que $G(\xi)$ reside na curva integral de r_k para uma única k -família. Para ter onda de rarefação entre dois estados u^L e u^R em uma mesma curva integral da k -família, é necessário que ξ seja monotonicamente crescente ou decrescente entre os estados. Note que a relação

$$\xi = \lambda_k(G(\xi)) \quad (2.25)$$

é válida, de modo que a monotonicidade de λ_k sobre a curva integral é equivalente à monotonicidade do parâmetro ξ . Para os casos de não linearidade genuína do k -campo de autovalores, $G(\xi)$ é uma parametrização da respectiva curva integral do autovetor r_k e para este tipo de onda as curvas características são

$$\lambda_k(u^L) < \lambda_k(u^R). \quad (2.26)$$

Os detalhes do cálculo da expressão de $G(\xi)$ são mostrados em [34, 37].

Observação 2.3. *Se o k -ésimo campo de autovalores característicos é genuinamente não linear supondo que $\|u^L - u^R\| \ll 1$, tem-se duas possibilidades:*

$$\lambda_k(u^L) < \lambda_k(u^R) \quad \text{ou} \quad (2.27)$$

$$\lambda_k(u^L) > \lambda_k(u^R). \quad (2.28)$$

Nos casos (2.27) e (2.28) as soluções são onda de rarefação e onda de choque, respectivamente.

Observação 2.4. *Para encontrar a solução de um problema de Riemann geral, com estados extremos u^L e u^R , deve-se determinar a sequência de ondas que conecta $u^L \leq u^R$, e respectivos estados intermediários. Para que a sequência seja válida, é necessário que as velocidades características e as velocidades de choque sejam crescentes de u^L a u^R .*

3 REVISÃO DE TRABALHOS ANTERIORES

Neste capítulo, realizaremos uma revisão da literatura envolvendo alguns artigos como o [6] e [11], onde os autores abordaram uma simplificação do modelo proposto em [1] com a finalidade de obter um modelo no qual é possível provar a existência das ondas viajantes por análise do espaço de fase. Assim como no [18], em que é apresentado outro modelo para combustão que considera perdas térmicas.

No presente trabalho, apresentaremos um modelo que é mais real, comparado com o modelo dado em [6, 11], já que considera-se os efeitos de perdas térmicas, a lei de Arrhenius correta e em geral as velocidades da temperatura e do oxigênio diferentes. O modelo de combustão analisado neste trabalho é semelhante aos modelos dos artigos revisados neste capítulo, assim são utilizadas algumas ideias desses artigos na prova da existência de ondas viajantes para o modelo estudado neste trabalho.

3.1 SOLUÇÕES DE PROBLEMAS DE RIEMANN PARA COMBUSTÃO EM ESPUMA POROSA LEVE

Nesta seção, será feita uma pequena revisão dos artigos [6] e [11] onde obtém-se uma classificação de todas as possíveis sequências de ondas nas soluções de problemas de Riemann para o Sistema (3.1)-(3.4), de três equações diferenciais parciais evolutivas que modela a combustão em um meio poroso. No modelo é considerado o fluxo unidimensional quando o ar é injetado em um meio poroso contendo inicialmente um combustível imóvel que não se vaporiza. Assume-se que o oxigênio e o calor são ambos transportados a velocidades iguais, isto acontece quando a capacidade térmica do meio comparada com a do ar é muito pequena (por exemplo, para espuma leve). Outra hipótese é que apenas uma pequena parte do espaço disponível é ocupado pelo combustível, de modo que as mudanças de porosidade durante a reação são desprezíveis. É considerado um equilíbrio térmico local. Assume-se também, que a variação da pressão é pequena comparada com a pressão predominante, é desprezada a expansibilidade do gás sob o aumento da temperatura.

No primeiro artigo, considerando a velocidade da onda de combustão positiva, foram estudadas a existência e unicidade de ondas viajantes e foram identificadas as sequências de ondas que aparecem nas soluções de problemas de Riemann. No segundo artigo esses resultados foram generalizados incluindo o caso da onda de combustão com velocidade negativa. Também foram apresentadas algumas simulações numéricas como exemplos dos resultados teóricos, fazendo uso do esquema de diferenças finitas de Crank-Nicolson.

O sistema associado a este modelo é

$$\partial_t \theta + a \partial_x \theta = \partial_{xx} \theta + \rho Y \phi, \quad (3.1)$$

$$\partial_t \rho = -\rho Y \phi, \quad (3.2)$$

$$\partial_t Y + a \partial_x Y = -\rho Y \phi, \quad (3.3)$$

$$\phi(\theta) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{1}{\theta}\right), & \theta > 0 \\ 0, & \theta \leq 0 \end{cases}, \quad (3.4)$$

onde a temperatura θ , a concentração do combustível sólido ρ e a concentração do oxigênio Y são as variáveis dependentes adimensionais. Tanto o oxigênio quanto o calor são transportados à velocidade $a > 0$. Uma reação exotérmica, i.e., reação química cuja energia é liberada em forma de calor, que envolve oxigênio e combustível sólido pode ocorrer quando a temperatura está acima da temperatura limite, normalizada a $\theta = 0$. A taxa de reação é dada na Equação (3.4) por $\phi(\theta)$.

O foco em [6, 11], está nas soluções $\rho \geq 0$ e $Y \geq 0$, para todo ponto no domínio. Considera-se o Sistema (3.1)-(3.3) sobre $0 < x < \infty$, $t \geq 0$ com as condições de fronteira

$$(\theta, Y, \rho)(0, t) = (\theta^L, Y^L, \rho^L), \quad \lim_{x \rightarrow \infty} (\theta, Y, \rho)(x, t) = (\theta^R, Y^R, \rho^R). \quad (3.5)$$

Admitindo que a reação não acontece na fronteira (fora da faixa do cilindro onde a combustão acontece), i.e. os termos da reação do Sistema (3.1)-(3.3) desaparecem na fronteira. Dado que foi usada a lei de Arrhenius truncada para a qual a temperatura começa a uma temperatura $\theta = 0$, existem três razões para os termos da reação desaparecerem, onde duas destas condições podem ocorrer simultaneamente.

- i) Controle da temperatura (*TC*) - a combustão não acontece para temperaturas baixas, $\theta \leq 0$;
- ii) Controle do combustível (*FC*) - a combustão não acontece pela falta de combustível, $\rho = 0$;
- iii) Controle do oxigênio (*OC*) - a combustão não acontece pela falta de oxigênio, $Y = 0$.

Assim, os estados nos quais os termos da reação desaparecem são classificados como: *TC*, *FC*, *OC*, *TC* \cap *FC*, *TC* \cap *OC*, *FC* \cap *OC* e *TC* \cap *FC* \cap *OC*. Porém, somente foram consideradas as condições de fronteira genéricas, no extremo esquerdo (L) e direito (R):

(L) Exatamente uma das seguintes condições se mantém: $\theta^L \leq 0$ ou $\rho^L = 0$ ou $Y^L = 0$.

(R) Exatamente uma das seguintes condições se mantém: $\theta^R \leq 0$ ou $\rho^R = 0$ ou $Y^R = 0$.

Portanto, os estados extremos apenas podem ser TC , FC e OC sem interseções, porém estas interseções não podem ser ignorados como possíveis estados intermediários.

Nestes artigos, é chamada de *onda de combustão*, a onda viajante continua não trivial com velocidade c , onde $c \neq 0$ e $c \neq a$. Quando $c < 0$ temos uma onda de combustão contra-fluxo e denotamos c por c_c , quando $0 < a < c$ temos uma onda de combustão rápida denotando c por c_f e no caso $0 < c < a$ temos uma onda de combustão lenta denotando c por c_s . As velocidades das ondas aparecem na sequência em ordem crescente da esquerda à direita.

3.1.1 Ondas de combustão e soluções de problemas de Riemann em espuma porosa leve

No Artigo [6], os autores fizeram uma descrição detalhada das sequências de ondas que dão solução ao problema de Riemann (3.1)-(3.4) com (3.5). Para isso, eles mostraram a existência de ondas de combustão que aproximam-se dos estados extremos exponencialmente (no seguinte sentido: os pontos de equilíbrio correspondentes aos estados, no sistema de EDOs associado, serem assintoticamente estáveis). Também mostrou a existência de ondas de contato ($c = 0$, $c = a$). Ainda, apresentam alguns exemplos numéricos das sequências que contêm estas ondas.

Em [6] usando o Teorema 3.1 é provado que se o estado à direita tem pouco oxigênio (i.e. $\theta^R + Y^R \leq 0$), então a reação não pode ocorrer; se tem uma quantidade moderada de oxigênio, existe uma onda de combustão na qual o oxigênio é esgotado na reação; e se tem muito oxigênio, existe uma onda de combustão na qual o combustível é esgotado na reação.

Teorema 3.1. *Sejam $a > 0$ fixo e (θ^R, ρ^R, Y^R) um estado do tipo TC , i.e. $\theta^R \leq 0, \rho^R > 0, Y^R > 0$. Além disso, assumimos que $\theta^R + Y^R > 0$. Então existe um estado (θ^L, ρ^L, Y^L) e uma velocidade $c_f > a$ associadas à uma onda de combustão $(\theta^L, \rho^L, Y^L) \xrightarrow{c_f} (\theta^R, \rho^R, Y^R)$ que aproxima seu estado à direita exponencialmente. No caso temos $\theta^L > 0$, e ρ^L ou Y^L ou ambos iguais a 0. Mais precisamente, para cada par (θ^R, ρ^R) , existe um único Y_*^R com $\theta^R + Y_*^R > 0$ tal que*

- (1) *Se $-\theta^R < Y^R < Y_*^R$, então existe uma onda de combustão do tipo $OC \xrightarrow{c_f} TC$;*
- (2) *Se $Y^R = Y_*^R$, então existe uma onda de combustão do tipo $FC \cap OC \xrightarrow{c_f} TC$;*
- (3) *Se $Y^R > Y_*^R$, então existe uma onda de combustão do tipo $FC \xrightarrow{c_f} TC$.*

Em todo caso, $\theta^R + Y^R = \theta^L + Y^L$ e $c_f = \frac{aY^R - aY^L}{Y^R - Y^L + \rho^L - \rho^R}$. No primeiro e terceiro casos também aproxima seu estado à esquerda exponencialmente, porém não no segundo caso. Não existem ondas de combustão com $c > a$ e $\theta^R + Y^R \leq 0$.

No artigo estudado nesta subseção usando o Teorema 3.2 (1) é provado que para cada estado à esquerda do tipo FC , e para o estado à esquerda $(0, 0, Y^L)$ com $Y^L > 0$, existe uma família uniparamétrica de estados à direita do tipo OC para a qual o estado à esquerda pode ser conectado por uma onda de combustão lenta. Por outro lado, usando o Teorema 3.2 (2) é provado que para ter uma onda de combustão lenta de velocidade c_s com estado à esquerda (θ^L, ρ^L, Y^L) do tipo TC e estado à direita (θ^R, ρ^R, Y^R) do tipo OC , a tripla $(\theta^L, \rho^L, \rho^R)$ pode ser escolhido arbitrariamente, então um triplo correspondente (θ^L, ρ^R, c_s) pode ser encontrado.

Teorema 3.2. *Sejam $a > 0$ fixo, $\theta^L \geq 0$, $\rho^L = 0$ e $Y^L > 0$.*

- (1) *Considere ondas do tipo $FC \xrightarrow{c_s} OC$ e $FC \cap TC \xrightarrow{c_s} OC$ ondas. Então para cada $\rho^R > 0$, existem únicos números $\theta^R > 0$ e c_s com $0 < c_s < a$, associados à uma onda de combustão de velocidade c_s de $(\theta^L, 0, Y^L)$ para $(\theta^R, \rho^R, 0)$. Além disso,*

$$\theta^R = \theta^L + Y^L \quad e \quad c_s = \frac{Y^L}{\rho^L + Y^L} a. \quad (3.6)$$

Estas ondas aproximam o estado à direita exponencialmente, e aproxima o estado à esquerda exponencialmente se, e somente se, $\theta^L > 0$, i.e. se, e somente se, o estado à esquerda é do tipo FC .

- (2) *$TC \xrightarrow{c_s} OC$ ondas. Fixe $a > 0$. Dados $\theta^L < 0$, $\rho^L > 0$ e Y^L com $\theta^L + Y^L > 0$. Então existem números $\rho^R > 0$, $\theta^R > 0$ e c_s , $0 < c_s < a$, tal que existe uma onda de combustão de velocidade c_s de (θ^L, ρ^L, Y^L) para $(\theta^R, \rho^R, 0)$. Além disso, $\theta^R = \theta^L + Y^L$ e as quantidades c_s e ρ^R são relacionadas pela fórmula*

$$c_s = \frac{aY^L}{Y^L - \rho^L + \rho^R}.$$

Estas ondas aproximam ambos estados extremos exponencialmente.

- (3) *Não existem outras ondas de combustão com velocidade c tal que $0 < c < a$. Em particular, não existem ondas de combustão lentas com $\theta^L + Y^L \leq 0$.*

Como o foco deste artigo está na sequência de ondas que representam a solução do problema de Riemann, também foram consideradas ondas de contato. Devido a que algumas destas ondas se expandem com o tempo, elas são análogas, porém não exatamente as ondas de contato clássicas. Para mais detalhes ver [6].

Note que uma sequência de duas ondas de contato com a mesma velocidade podem ser combinadas em uma. Então podemos assumir que

- (O) Existe no máximo uma descontinuidade de contato com velocidade 0 e uma de velocidade a .

Assim, usando as hipóteses (L), (R) e (O) em [6] provou-se que existem onze ondas de contato que podem ocorrer nas possíveis seqüências de ondas. Estas ondas de contato podem ser observadas na Figura 2 onde quatro tem velocidade $c = 0$ e sete tem velocidade $c = a$.

Por outro lado, na Figura 2 pode-se observar as 18 possíveis seqüências que contêm as ondas de combustão e de contato encontradas em [6]. Para observar estas seqüências é preciso fixar um estado à direita (FC , OC ou TC) e seguir as setas, em sentido contrário, o mais longe possível até cada um dos estados à esquerda (FC , OC ou TC).

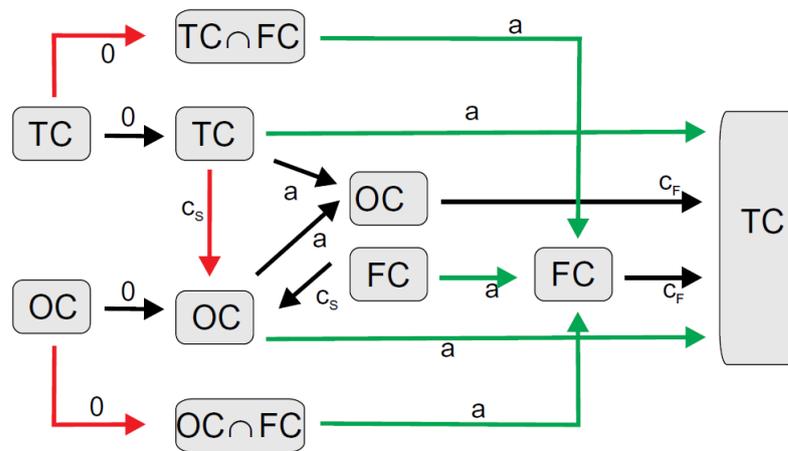


Figura 2 – Todas as seqüências de ondas possíveis para ondas de combustão com velocidade positiva e que satisfazem as condições seguintes: (1) o estado à esquerda é do tipo TC , FC ou OC ; (2) aumento da velocidade da onda; (3) seqüências estendidas o mais longe possível.

Um exemplo das simulações numéricas onde a seqüência contém uma onda de combustão lenta, uma de contato e uma de combustão rápida é mostrado na Figura 3. Para observar esta seqüência na Figura 3.1: o estado à direita TC é fixado, logo passando por dois estados intermediários OC o estado FC é atingido.

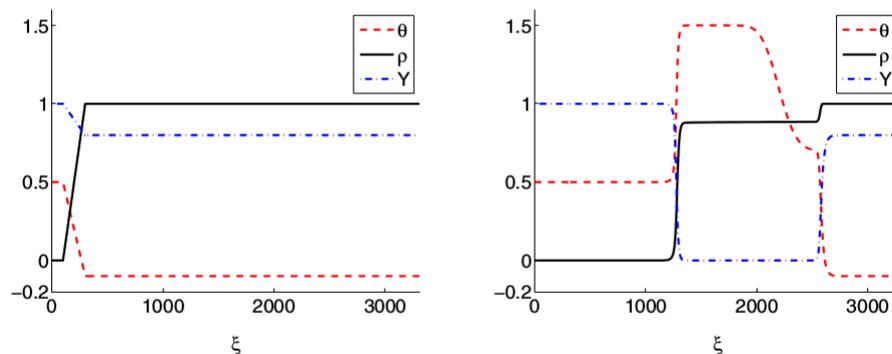


Figura 3 – A condição inicial é plotada na esquerda e a simulação no tempo 400 na direita com $a = 5$. Ambas figuras correspondem à seqüência $FC \xrightarrow{c_s} OC \xrightarrow{a} OC \xrightarrow{c_f} TC$.

3.1.2 Soluções de Problemas de Riemann para combustão contra-fluxo em espuma porosa leve

No Artigo [11], os autores enunciaram e mostraram a Proposição 3.1 e o Teorema 3.3 donde se obtêm três possíveis ondas de combustão com velocidade negativa. Essas ondas são usadas para completar as sequências obtidas em [6] obtendo assim todas as possíveis sequências de ondas nas soluções dos problemas de Riemann (3.1)-(3.5).

No artigo revisado nesta subseção, usando a Proposição 3.1 e o Teorema 3.3 a classificação de todas as possíveis sequências na solução de problemas de Riemann são extendidas pela inclusão de ondas de combustão com velocidade negativa como será apresentada na Figura 4.

Proposição 3.1. *Não é possível ter ondas viajantes do Sistema (3.1)-(3.3) com velocidade negativa exceto $TC \xrightarrow{c_c} OC$ e $TC \xrightarrow{c_c} FC$.*

Teorema 3.3. *Sejam $a > 0$ e (θ^L, ρ^L, Y^L) um estado do tipo TC , isto é, $\theta^L = 0$. Além disso, suponha que $\theta^L + Y^L > 0$. Então existem um estado (θ^R, ρ^R, Y^R) e uma velocidade $c_c < 0$ associados a uma onda de combustão $(\theta^L, \rho^L, Y^L) \xrightarrow{c_c} (\theta^R, \rho^R, Y^R)$ onde (i) $\theta^R > 0$ e (ii) ρ^R ou Y^R ou ambas são iguais a 0. Além disso, $\theta^R + Y^R = \theta^L + Y^L$*

$$c_c = \frac{aY^R - aY^L}{Y^R - Y^L + \rho^L - \rho^R} \quad (3.7)$$

Não existe onda de combustão com $c_c < 0$ e $\theta^L + Y^L \leq 0$.

Vale notar que na prova do Teorema 3.3 foram usadas as coordenadas viajantes no sistema de EDPs para torna-lo um sistema de EDOs. Logo, definiu-se três subconjuntos conforme as posições relativas das linhas invariantes do sistema de EDOs. Por fim, fazendo

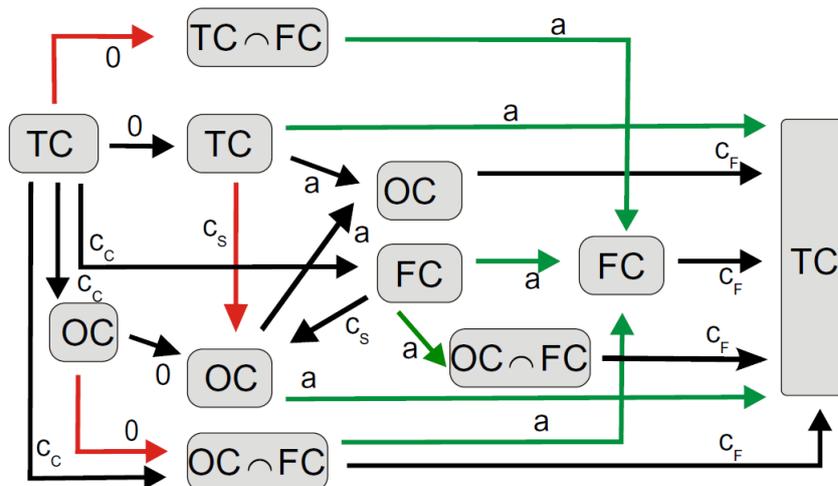


Figura 4 – Todas as sequências de ondas possíveis para ondas de combustão com (1) o estado à esquerda é do tipo TC , FC ou OC , (2) aumento da velocidade da onda, (3) sequências estendidas o mais longe possível.

uso do Teorema da Variedade Estável provou-se a existência de uma órbita heteroclínica, para cada subconjunto, no retrato de fase do sistema de EDOs. Usando a integral de Melnikov foi provada a unicidade apenas para uma das órbitas possíveis que corresponde ao comportamento do sistema de EDOs em um dos subconjuntos.

Um exemplo das simulações numéricas é mostrado na Figura 5 em que a sequência contém uma onda de combustão contra-fluxo, de combustão lenta, de contato e de combustão rápida.

A simulação usou o parâmetro $a = 0.01$, tamanho de passo $\Delta x = 1.3$, passo de tempo variável para acelerar as simulações e um número da malha total 1940.

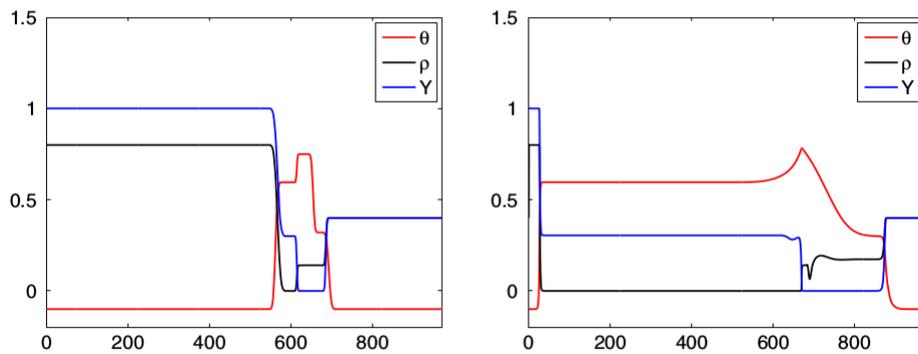


Figura 5 – A condição inicial é plotada na esquerda e a simulação no tempo 800 na direita. Ambas figuras correspondem à sequência $TC \xrightarrow{c_c} FC \xrightarrow{c_s} OC \xrightarrow{a} OC \xrightarrow{c_f} OC$.

3.2 FRENTES DE COMBUSTÃO SEM GÁS COM PERDAS TÉRMICAS

Em [18], os autores abordaram um modelo de combustão sem gás com perdas térmicas. Para ter combustão é preciso de calor, combustível e oxigênio. No entanto, o modelo de “combustão sem gás” refere-se que na reação existe uma quantidade de gás, que contém oxigênio, relativamente grande em comparação com a quantidade do combustível. Isto é, a combustão não deixa de ocorrer por falta de oxigênio, já que neste primeiro caso vai faltar o combustível.

Os autores neste artigo estão interessados na existência das frentes de combustão viajantes e sua estabilidade. A demonstração da existência das frentes de combustão como ondas viajantes está baseada na análise do espaço de fase e na Teoria Geométrica de Perturbação Singular. Para estudar a estabilidade é usado um critério baseado na chamada função de Evans.

O sistema associado a este modelo é

$$\partial_t \theta = \partial_{xx} \theta + \rho \phi(\theta - \bar{\theta}_1) - \beta \theta, \quad (3.8)$$

$$\partial_t \rho = k \partial_{xx} \rho + \eta \rho \phi(\theta - \bar{\theta}_1), \quad (3.9)$$

com $\eta > 0$, $\beta \geq 0$, $k \geq 0$ e

$$\phi(\theta) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{1}{\theta}\right) & \theta > 0, \\ 0 & \theta \leq 0, \end{cases} \quad (3.10)$$

onde θ é a temperatura, ρ é a concentração do combustível, $\theta = \bar{\theta}_1$ é a temperatura abaixo a qual a reação não ocorre (temperatura de ignição), e $\theta = 0$ é a temperatura ambiente. Assume-se que $\bar{\theta}_1 = 0$, assim a reação não ocorre à temperatura ambiente. A função ϕ é a taxa de reação, que é uma função da temperatura. A temperatura, x e t têm sido escaladas para normalizar a primeira equação. η é o *parâmetro de exotermicidade*; quanto maior for η mais combustível deve ser queimado para atingir um determinado aumento de temperatura. k é a difusividade do combustível, que é o inverso do número de Lewis; se $k = 0$, o combustível é um sólido. O termo $\beta\theta$ representa as perdas térmicas ao meio segundo a lei do resfriamento de Newton. A 4-upla $(\eta, \bar{\theta}_1, \beta, k)$ é um vetor de parâmetros.

Ao longo de todo este artigo ρ no estado não queimado é normalizada a 1.

Para provar os Teoremas 3.4, 3.5 e 3.6 no Sistema (3.8)-(3.9) a coordenada espacial x é substituída por $\xi = x - \sigma t$ obtendo um sistema de EDOs, tal que as soluções estacionárias do sistema de EDOs obtido são soluções na forma de ondas viajantes do Sistema (3.8)-(3.9) e satisfazem

$$0 = \partial_{\xi\xi}\theta + \sigma\partial_{\xi}\theta + \rho\phi(\theta - \bar{\theta}_1) - \beta\theta, \quad (3.11)$$

$$0 = k\partial_{\xi\xi}\rho + \sigma\partial_{\xi}\rho + \eta\rho\phi(\theta - \bar{\theta}_1). \quad (3.12)$$

No artigo revisado nesta seção usando o Teorema 3.4 a existência e unicidade de soluções para o Sistema (3.11)-(3.12) sem perdas térmicas ($\beta = 0$) e com termo de difusão do combustível zero ($k = 0$) é mostrada. Seja $\vartheta = \partial_{\xi}\theta$ e usando (') para denotar a derivada com respeito a ξ é obtido

$$\theta' = \vartheta, \quad (3.13)$$

$$\vartheta' = -\sigma\vartheta - \rho\phi(\theta - \bar{\theta}_1), \quad (3.14)$$

$$\rho' = \frac{\eta}{\sigma}\rho\phi(\theta - \bar{\theta}_1), \quad (3.15)$$

com o vetor de parâmetros $(\eta, \bar{\theta}_1, \sigma)$.

A solução do Sistema (3.11)-(3.12) que satisfaz as condições de fronteira

$$\lim_{\xi \rightarrow -\infty} (\theta, \partial_{\xi}\theta, \rho)(\xi) = (\theta^*, 0, 0), \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} (\theta, \partial_{\xi}\theta, \rho)(\xi) = (0, 0, 1), \quad (3.16)$$

corresponde a uma solução de (3.13)-(3.15) que liga os equilíbrios $(\theta^*, 0, 0)$ e $(0, 0, 1)$.

Teorema 3.4. *Para $k = \beta = 0$ e $(\eta, \bar{\theta}_1)$ fixo, existe uma única velocidade $\sigma = \sigma_0(\eta, \bar{\theta}_1)$ tal que o modelo de combustão sem gás (3.8)-(3.9) tem uma onda viajante de velocidade σ que conecta um estado $(\theta^*, 0, 0)$ ao estado não queimado $(0, 0, 1)$. A temperatura de combustão θ^* é $\frac{1}{\eta}$. A função $\sigma_0(\eta, \bar{\theta}_1)$ é suave.*

Em [18], foi provado o Teorema 3.5, onde as soluções do Sistema (3.8)-(3.9) para $k = 0$ e $\beta > 0$ são apresentadas como pequenas perturbações do mesmo para $k = 0$ e $\beta = 0$. No Sistema (3.11)-(3.12) denotando $\vartheta = \partial_\xi \theta$ e usando (\prime) para denotar a derivada com respeito a ξ é obtido

$$\theta' = \vartheta, \quad (3.17)$$

$$\vartheta' = -\sigma\vartheta - \rho\phi(\theta - \bar{\theta}_1) + \beta\theta, \quad (3.18)$$

$$\rho' = \frac{\eta}{\sigma}\rho\phi(\theta - \bar{\theta}_1), \quad (3.19)$$

com o vetor de parâmetros $(\eta, \bar{\theta}_1, \sigma, \beta)$.

Uma solução do Sistema (3.11)-(3.12) que satisfaz as condições de fronteira

$$\lim_{\xi \rightarrow -\infty} (\theta, \partial_\xi \theta, \rho)(\xi) = (0, 0, \rho^*), \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} (\theta, \partial_\xi \theta, \rho)(\xi) = (0, 0, 1). \quad (3.20)$$

corresponde à solução de (3.17)-(3.19) que liga os equilíbrios $(0, 0, \rho^*)$ e $(0, 0, 1)$.

Teorema 3.5. *Para $k = 0$, $(\eta, \bar{\theta}_1)$ fixo, e $\beta > 0$ pequeno, existe uma única velocidade $\sigma = \sigma_1(\eta, \bar{\theta}_1, \beta)$ próxima à velocidade $\sigma_0(\eta, \bar{\theta}_1)$ do Teorema 3.4 tal que o modelo de combustão sem gás (3.8)-(3.9) tem uma onda viajante de velocidade σ que conecta um estado queimado $(0, 0, \rho^*)$ a um estado não queimado $(0, 0, 1)$. A concentração do estado combustível ρ^* é positiva, e $\rho^* \rightarrow 0$ conforme $\beta \rightarrow 0$. A função $\sigma_1(\eta, \bar{\theta}_1, \beta)$ definida para $\beta \geq 0$, com $\sigma_1(\eta, \bar{\theta}_1, 0)$, é suave. Conforme $\beta \rightarrow 0$, no espaço $\theta \vartheta \rho$ a solução heteroclínica correspondente de (3.17)-(3.19) aproxima a união da solução heteroclínica com $\beta = 0$ do Teorema 3.8, com velocidade $\sigma = \sigma_0(\eta, \bar{\theta}_1)$, e o segmento de linha $(0, 0, 0)$ a $(\frac{1}{\eta}, 0, 0)$.*

No Teorema 3.6, se apresenta as soluções do Sistema (3.8)-(3.9) para $k > 0$ e $\beta > 0$ como pequenas perturbações do mesmo para $k = 0$ e $\beta > 0$.

Considerando (3.11)-(3.12) com $(\eta, \bar{\theta}_1)$ fixo, $\beta \geq 0$, $k > 0$. Para $\beta = 0$ são usadas as condições de fronteira

$$\lim_{\xi \rightarrow -\infty} (\theta, \partial_\xi \theta, \rho, \partial_\xi \rho)(\xi) = (\theta^*, 0, 0, 0), \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} (\theta, \partial_\xi \theta, \rho, \partial_\xi \rho)(\xi) = (0, 0, 1, 0). \quad (3.21)$$

Para $\beta > 0$ são usadas as condições de fronteira

$$\lim_{\xi \rightarrow -\infty} (\theta, \partial_\xi \theta, \rho, \partial_\xi \rho)(\xi) = (0, 0, \rho^*, 0), \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} (\theta, \partial_\xi \theta, \rho, \partial_\xi \rho)(\xi) = (0, 0, 1, 0). \quad (3.22)$$

No Sistema (3.11)-(3.12) denotando por $\vartheta = \partial_\xi \theta$, $\vartheta = \partial_\xi$, $\varrho = \partial_\xi \rho$, e usando (\prime) para denotar a derivada com respeito a ξ é obtido

$$\theta' = \vartheta, \quad (3.23)$$

$$\vartheta' = -\sigma\vartheta - \rho\phi(\theta - \bar{\theta}_1) + \beta\theta, \quad (3.24)$$

$$\rho' = \varrho, \quad (3.25)$$

$$k\varrho' = -\sigma\varrho + \eta\rho\phi(\theta - \bar{\theta}_1). \quad (3.26)$$

Este sistema que tem o vetor de parâmetros $(\eta, \bar{\theta}, \sigma, \beta, k)$. Restringindo-se para $k > 0$, $\beta \geq 0$, e $\sigma > 0$. Para $k > 0$, a solução de (3.11)-(3.12) que satisfaz as condições de fronteira (3.21) (respectivamente, (3.22)) que corresponde a solução de (3.23)-(3.26) que liga um equilíbrio $(\theta^*, 0, 0, 0)$ (respectivamente, $(0, 0, \rho^*, 0)$) com o equilíbrio $(0, 0, 1, 0)$.

Teorema 3.6. *Para $(\eta, \bar{\theta}_1)$ fixo, $\beta \geq 0$ e $\kappa \geq 0$, existe uma velocidade $\sigma = \sigma(\eta, \bar{u}, \beta)$, tal que o modelo de combustão sem gás (3.8)-(3.9) tem uma onda viajante de velocidade σ com as seguintes propriedades:*

1. *Para $k > 0$ e $\beta = 0$, a onda que conecta um estado $(\theta^*, 0, 0, 0)$ ao estado não queimado $(0, 0, 1, 0)$. A temperatura da combustão θ^* é positiva, e $\theta^* \rightarrow \frac{1}{\eta}$ conforme $\beta \rightarrow 0$;*
2. *Para $k > 0$ e $\beta > 0$, a onda conecta um estado queimado $(0, 0, \rho^*, 0)$ ao equilíbrio $(0, 0, 1, 0)$. A concentração do combustível não queimado ρ^* é positiva, e $\rho^* \rightarrow 0$ conforme $\beta \rightarrow 0$.*

A função $\sigma(\eta, \bar{\theta}_1, \beta, k)$ é suave. Para $\beta \geq 0$ e $k \geq 0$ pequenos, não existem outras ondas viajantes com velocidade próxima $\sigma_0(\eta, \bar{\theta}_1)$.

4 MODELO PARA COMBUSTÃO COM PERDA TÉRMICA

O modelo para combustão in-situ abordado em [5] é uma versão simplificada do modelo proposto em [1]. Neste capítulo não apenas apresentaremos o modelo estudado em [5], mas também consideraremos os termos de difusão nesse modelo. Dessa forma, vamos provar de forma rigorosa a existência e unicidade de ondas viajantes para o modelo sem termos difusivos no Capítulo 5 e logo comparar numericamente as soluções para ambos modelos no Capítulo 6.

Usando a notação e hipóteses de [13, 7], assumimos que o fluxo é unidimensional, que o ar (oxigênio) é injetado na parte mais à esquerda de um cilindro de rocha porosa que contém um gás não reativo e um combustível que é essencialmente imóvel. Consideramos que apenas uma pequena parte do espaço disponível é ocupada pelo combustível, de modo que as mudanças de porosidade do meio durante a reação são desprezíveis. Assim a porosidade φ é constante. É adotada a hipótese de equilíbrio térmico local, isto é, a temperatura do sólido e do gás é a mesma. Neste trabalho estamos preocupados com as perdas de calor, que consideramos linearmente dependentes da diferença da temperatura com a temperatura do reservatório, veja por exemplo [1]. Também assumimos que as variações de pressão são pequenas em comparação com a pressão do reservatório.

O modelo com coordenada de tempo t e coordenada de espaço x inclui a equação de equilíbrio de calor (4.1), as equações de equilíbrio molar para oxigênio (4.2) e para o combustível imóvel (4.3). Em vez de considerar a Lei do gás ideal, assumimos que a densidade molar de gás ρ [$mole/m^3$] é constante; e daí segue-se que a velocidade do gás Darcy u [m/s] também é constante.

Em resumo temos o Sistema

$$C_m \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(c_g \rho_g u (T - T_{res}))}{\partial x} = k_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \alpha(T - T_{res}) + Q_r \rho Y W_r, \quad (4.1)$$

$$\varphi \frac{\partial(Y \rho_g)}{\partial t} + \frac{\partial(Y \rho_g u)}{\partial x} = D_M \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_g \frac{\partial Y}{\partial x} \right) - \mu_o \rho Y W_r, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\mu_f \rho Y W_r, \quad (4.3)$$

onde T [K] é a temperatura, Y [$mole/mole$] é a fração molar de oxigênio no gás, ρ [$mole/m^3$] é a concentração molar de combustível imóvel. Os parâmetros do sistema, com seus valores típicos, são dados na Tabela 1. Esses parâmetros são constantes (negligenciando a dependência da temperatura, concentração do gás, etc.), uma hipótese que foi usada no Sistema (4.1)-(4.3).

Na reação de combustão, μ_f moles de combustível imóvel reagem com μ_o moles de oxigênio para gerar μ_g moles de produtos gasosos e, possivelmente, produtos sólidos não

reativos. Por simplicidade, consideramos o caso $\mu_f = \mu_o = \mu_g = 1$ como, por exemplo, na reação $C + O_2 \rightarrow CO_2$. A taxa de reação é proporcional a W_r dado por

$$W_r = k_p \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right), \quad (4.4)$$

onde os valores típicos de k_p e E_r também são apresentados na Tabela 1. Os valores na Tabela 1 já foram usados em [1, 7, 8, 10, 13].

Tabela 1 – Parâmetros dimensionais para combustão in-situ e seus valores típicos.

<i>Símbolo</i>	<i>Quantidade física</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>
T_{res}	Temperatura inicial do reservatório	273	[K]
C_m	Capacidade térmica volumétrica do meio poroso	$2 \cdot 10^6$	[J/m ³ K]
c_g	Capacidade térmica molar do gás	27.42	[J/mole K]
ρ_g	Média da densidade do gás	45	[mole/m ³]
k_T	Condutividade térmica do meio poroso	0.87	[J/(m s K)]
D_M	Coefficiente de difusão efetivo na fase gasosa	$2.014 \cdot 10^6$	[m ² /s]
Q_r	Entalpia do combustível imóvel em T_{res}	$4 \cdot 10^5$	[J/mole]
E_r	Energia de ativação	58000	[J/mole]
k_p	Parâmetro pré-exponencial	500	[1/s]
R	Constante ideal dos gases	8.314	[J/(mole K)]
φ	Porosidade	0.3	[.]
u	Velocidade de Darcy do gás injetado (200m/day)	$2.3 \cdot 10^{-3}$	[m/s]
ρ^{res}	Densidade molar inicial do combustível	372	[mole/m ³]
α	Condutividade térmica específica	0.2	[J/(m ³ s K)]
Y_{inj}	Concentração do oxigênio injetado	1.0	[.]

4.1 ADIMENSIONALIZAÇÃO DO MODELO

Para adimensionalizar o problema são introduzidas algumas variáveis dependentes e independentes adimensionais (denotadas por tildes) como razões das quantidades dimensionais e quantidades de referência (denotadas por estrelas):

$$\tilde{t} = \frac{t}{t^*}, \quad \tilde{x} = \frac{x}{x^*}, \quad \tilde{\theta} = \Delta\tilde{T} = \frac{T - T_{res}}{\Delta T^*}, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho^*}, \quad \tilde{Y} = \frac{Y}{Y^*}. \quad (4.5)$$

Nossa escolha para quantidades de referência é

$$v^* = \frac{Y_{inj}\rho_g u}{\rho^{res}}, \quad t^* = \frac{1}{k_p Y_{inj}}, \quad x^* = v^* t^*, \quad \Delta T^* = \frac{Q_r \rho^{res}}{C_m}, \quad \rho^* = \rho^{res}, \quad Y^* = Y_{inj}, \quad (4.6)$$

as quantidades físicas são apresentadas na Tabela 1.

Na Equação (4.6), t^* é o tempo característico para a combustão do combustível na temperatura inicial do reservatório T_{res} ; ΔT^* é o afastamento da temperatura máxima da temperatura do reservatório, para o caso de combustão completa do combustível

em condições adiabáticas. Usando as Equações (4.5) e (4.6) e omitindo os tildes, o Sistema (4.1)-(4.4) é reescrito na forma adimensional como segue nas variáveis dependentes temperatura θ , fração de oxigênio Y e combustível ρ :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + v_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} = \lambda_\theta \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \beta \theta + \rho Y \phi, \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + v_Y \frac{\partial Y}{\partial x} = \lambda_Y \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} - \mu_Y \rho Y \phi, \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho Y \phi, \quad (4.9)$$

$$\phi = \exp\left(\frac{-\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right), \quad (4.10)$$

com constantes adimensionais

$$\begin{aligned} v_\theta &= \frac{c_g \rho_g u}{v^* C_m}, & \lambda_\theta &= \frac{k_T}{C_m v^*}, & \beta &= \frac{\alpha t^*}{C_m}, & v_Y &= \frac{u}{\varphi v^*}, \\ \lambda_Y &= \frac{D_M}{\varphi v^*}, & \mu_Y &= \frac{k_p \rho^{res} t^*}{\varphi \rho_g}, & \varepsilon &= \frac{E_r}{R \Delta T^*}, & \theta_0 &= \frac{T_{res}}{\Delta T^*}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde v_θ e v_Y são velocidades adimensionais das ondas térmica e de oxigênio; β é o coeficiente constante de perdas térmicas; k_T representa o coeficiente de difusão térmica adimensional; μ_Y representa a quantidade de oxigênio adimensional consumida durante a reação química; ε é a energia de ativação escalada e θ_0 é a temperatura do reservatório escalada.

A zona de combustão é modelada como uma onda viajante estacionária. Fisicamente, não existe combustão adiante nem atrás desta zona, isto é, a taxa de reação ϕ deve desaparecer. Como elas viajam para a direita, elas conectam um estado queimado ($\rho = 0$) à esquerda a um estado não queimado ($Y = 0$) à direita.

4.2 MODELO ADIMENSIONAL SIMPLIFICADO

Até agora não tem sido provada a existência da solução para (4.7)-(4.10) na literatura. Entretanto, existem trabalhos onde os autores consideraram algumas simplificações deste modelo. Por exemplo, temos os artigos revisados na Seção 3.1, onde as perdas térmicas foram omitidas, consideram uma lei de Arrhenius truncada e foi desprezada a expansibilidade do gás sob o aumento da temperatura. Assim como desprezaram a capacidade térmica do meio comparada com a do ar, daí que o oxigênio e o calor foram ambos transportados à velocidade do gás em movimento. Como outro exemplo de modelo simplificado temos [18], revisado na Seção 3.2 onde ainda que as perdas térmicas são levadas em conta, se considera uma lei de Arrhenius truncada e se despreza a influência do oxigênio no termo da combustão.

Neste trabalho inspirados nesses artigos, estudamos uma simplificação do Sistema (4.7)-(4.10) na qual negligenciamos os efeitos da difusão térmica ($\lambda_\theta = 0$) e da difusão do oxigênio ($\lambda_Y = 0$). Esta simplificação também foi usada em [5]:

$$\partial_t \theta + v_\theta \partial_x \theta = -\beta \theta + \rho Y \phi, \quad (4.12)$$

$$\partial_t Y + v_Y \partial_x Y = -\mu_Y \rho Y \phi, \quad (4.13)$$

$$\partial_t \rho = -\rho Y \phi, \quad (4.14)$$

$$\phi = \exp\left(\frac{-\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right). \quad (4.15)$$

Temos três variáveis adimensionais dependentes: temperatura θ , concentração do oxigênio Y e concentração do combustível sólido ρ . O oxigênio Y é um componente do gás que se move com velocidade $v_Y > 0$ e o calor θ é transportado com velocidade $v_\theta > 0$. A taxa de reação é uma função da temperatura dada em (4.15) por $\phi(\theta)$. A Equação (4.12) representa o transporte da temperatura, as perdas térmicas ao meio poroso e geração da energia térmica pela combustão. A Equação (4.13) representa o transporte do oxigênio e o consumo de oxigênio na combustão. A Equação (4.14) representa o consumo do combustível sólido, o qual não se difunde e não é transportado pelo gás.

Estamos interessados em soluções com $\rho \geq 0$ e $Y \geq 0$. Consideramos (4.12)-(4.14) em $0 < x < \infty$, $t \geq 0$ com as condições de fronteira (constantes):

$$(\theta, Y, \rho)(0, t) = (\theta^L, Y^L, \rho^L), \quad \lim_{x \rightarrow \infty} (\theta, Y, \rho)(x, t) = (\theta^R, Y^R, \rho^R). \quad (4.16)$$

Assumimos que a reação não ocorre na fronteira, isto é, os termos da reação em (4.12)-(4.14) são zero fora da faixa do cilindro onde a combustão acontece e como é assumida a lei de Arrhenius correta temos que a reação não se reduz a zero. Assim existem apenas duas razões para zerar os termos da reação:

- i) *FC* - a reação termina pela falta do combustível, $\rho = 0$;
- ii) *OC* - a reação termina pela falta do oxigênio, $Y = 0$.

5 EXISTÊNCIA E UNICIDADE DE ONDAS VIAJANTES

Neste capítulo, provaremos a existência e unicidade da solução em forma de ondas viajantes para o Sistema de EDPs (4.12)-(4.14) sujeito à (4.16), isto equivale a provar a existência e unicidade de uma órbita do Sistema de EDOs associado que conecta dois equilíbrios hiperbólicos. Para isso, vamos identificar as sequências de ondas que podem descrever as soluções de problemas de Riemann do sistema [13, 6].

Seguindo [9, 6], denotamos por $(\theta^L, Y^L, \rho^L) \xrightarrow{v} (\theta^R, Y^R, \rho^R)$ uma onda de combustão com velocidade $v > 0$ que conecta os estados extremos (θ^L, Y^L, ρ^L) à esquerda com (θ^R, Y^R, ρ^R) à direita. Nos estados extremos da onda, os termos da reação em (4.12)-(4.14) desaparecem, na verdade todo o termo fonte é zero. Estes estados podem ser ou *FC* (controle de combustível, $\rho = 0$) ou *OC* (controle de oxigênio, $Y = 0$), já que utilizamos a lei de Arrhenius correta (4.15). O tipo de estado indica exatamente quais condições se mantêm nesse estado. Em consequência, da adimensionalização construída na Seção 4.1, consideramos que $\rho = 1$ no estado *OC* e $Y = 1$ no estado *FC*.

Uma condição necessária para garantir a existência de uma sequência de ondas que descreve a solução de problemas de Riemann é que deve começar em um estado de equilíbrio (*FC* ou *OC*) e terminar em outro estado de equilíbrio (*FC* ou *OC*), veja [42]. Dessa forma, nas seguintes seções mostraremos a existência das ondas presentes nestas sequências que ligam os equilíbrios *FC* e *OC* em ambos os extremos.

5.1 ONDAS DA PARTE HIPERBÓLICA DO MODELO

Como parte da prova do resultado principal deste capítulo, que se reduz a identificar as sequências de ondas que podem descrever as soluções de problemas de Riemann para o Sistema (4.12)-(4.14), nesta seção estudaremos a existência das ondas da parte hiperbólica desse modelo, que aparecem nessas sequências. A existência destas ondas está associada às regiões do meio poroso onde não ocorre combustão e por isto os termos de reação são nulos ($\rho = 0$ ou $Y = 0$), veja [6, 11, 31]. Dessa forma, nosso modelo se reduz a três equações lineares desacopladas:

$$\partial_t \theta + v_\theta \partial_x \theta = -\beta \theta, \quad (5.1)$$

$$\partial_t Y + v_Y \partial_x Y = 0, \quad (5.2)$$

$$\partial_t \rho = 0. \quad (5.3)$$

Observação 5.1. *No caso de não considerar os termos da reação ($\phi = 0$) nem as perdas térmicas ($\beta = 0$) no Sistema (4.12)-(4.14), poderíamos analisar este sistema segundo a teoria de leis de conservação revisada na Seção 2.3. Daí, os autovalores característicos e seus correspondentes autovetores são:*

$$\begin{aligned}\lambda_\theta &= v_\theta, & (1, 0, 0)^T; \\ \lambda_Y &= v_Y, & (0, 1, 0)^T; \\ \lambda_\rho &= 0, & (0, 0, 1)^T.\end{aligned}$$

Temos três ondas de contato: onda térmica com velocidade v_θ , onda de gás com velocidade v_Y e onda de combustível estacionária conforme a Seção 2.3.

Agora, voltando para o Sistema (5.1)-(5.3), no qual levamos em conta as perdas térmicas ($\beta > 0$), podemos enunciar os seguintes teoremas:

Teorema 5.1. *No Sistema (5.1)-(5.3) que corresponde ao Sistema (4.12)-(4.15) com $\phi = 0$ existem ondas de gás e de combustível mas não existe onda térmica.*

Demonstração. Sem perda de generalidade supomos que $v_\theta < v_Y$. Na ausência das ondas de combustão supomos que existem as três ondas de contato encontradas na Observação 5.1. Logo, temos 4 estados constantes, onde o estado extremo à esquerda é dado por (θ^L, Y^L, ρ^L) e o estado extremo à direita é (θ^R, Y^R, ρ^R) . Como o Sistema (5.1)-(5.3) é desacoplado, então podemos resolver o sistema independentemente.

Considerando a Equação (5.2), resolvemos o seguinte PVI:

$$\begin{cases} \partial_t Y + v_Y \partial_x Y = 0. \\ Y(x, 0) = Y^0 = \begin{cases} Y^L & \text{se } x < 0, \\ Y^R & \text{se } x > 0. \end{cases} \end{cases} \quad (5.4)$$

Daí,

$$\begin{aligned}x'(t) = v_Y &\longrightarrow x(t) = v_Y t + x^0, \\ \frac{d}{dt} Y(x(t), t) = 0 &\longrightarrow Y(x(t), t) = \begin{cases} Y^L & \text{se } x < v_Y t, \\ Y^R & \text{se } x > v_Y t. \end{cases} \end{aligned} \quad (5.5)$$

De maneira análoga, usando a Equação (5.3) resolvemos o seguinte PVI

$$\begin{cases} \partial_t \rho = 0. \\ \rho(x, 0) = \rho^0 = \begin{cases} \rho^L & \text{se } x < 0, \\ \rho^R & \text{se } x > 0. \end{cases} \end{cases} \quad (5.6)$$

Logo,

$$\begin{aligned}x'(t) = 0 &\longrightarrow x(t) = x^0, \\ \frac{d}{dt} \rho(x(t), t) = 0 &\longrightarrow \rho(x(t), t) = \begin{cases} \rho^L & \text{se } x < 0, \\ \rho^R & \text{se } x > 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (5.7)$$

Assim, da Equação (5.5) a onda de gás pode ter salto somente na concentração do oxigênio Y , portanto a onda de gás conecta os estados (θ^L, Y^L, ρ^L) e (θ^L, Y^R, ρ^L) . Usando a Equação (5.7) segue que os estados separados pela onda de combustível variam apenas na componente ρ . Veja a Figura 6 (esquerda).

Agora, vamos resolver o seguinte PVI para a onda térmica

$$\begin{cases} \partial_t \theta + v_\theta \partial_x \theta = -\beta \theta. \\ \theta(x, 0) = \theta^0, \end{cases} \quad (5.8)$$

$$x'(t) = v_\theta \longrightarrow x(t) = v_\theta t + x^0,$$

$$\frac{d}{dt} \theta(x(t), t) = -\beta \theta(x(t), t) \longrightarrow \theta(x(t), t) = \theta^0 e^{-\beta t}. \quad (5.9)$$

Agora, como θ em cada estado deve ser constante. Utilizando a Equação (5.9), segue que isso somente é possível quando $\theta = 0$ em cada estado. Logo, $\theta^L = \theta^R = 0$. Assim, não existe onda térmica como se observa na Figura 6 (direita).

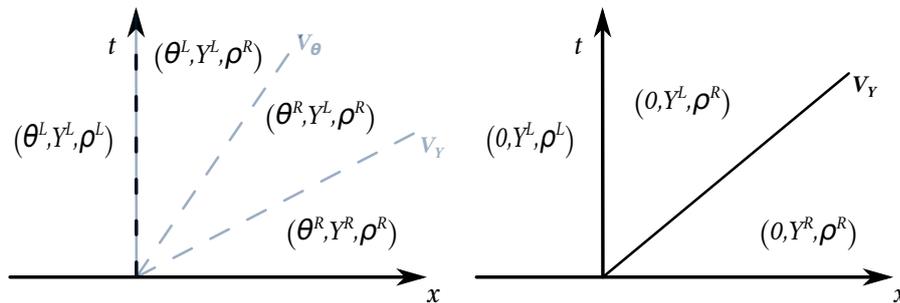


Figura 6 – Leque de Riemann para o Sistema (5.1)-(5.3) representando os estados constantes no espaço (θ, Y, ρ) separados: (esquerda) pela onda de combustível, onda térmica e onda de gás supondo que estas ondas existem; (direita) pela onda de combustível e de gás.

No caso $v_\theta > v_\gamma$ a demonstração é análoga.

□

Como será provado no seguinte capítulo se existir onda de combustão segue que $v < v_\gamma$.

Teorema 5.2. *Supondo que exista onda de combustão com $0 < v < v_\gamma$ para o Sistema (4.12)-(4.15). As ondas encontradas na Observação 5.1 não existem nas soluções do Sistema (4.12)-(4.15) considerando as condições de fronteira $(\theta^L, Y^L, \rho^L) = (0, 1, 0)$ e $(\theta^R, Y^R, \rho^R) = (0, 0, 1)$.*

Demonstração. Caso existir uma onda térmica, esta onda deve separar dois estados constantes. De maneira análoga ao teorema anterior temos que não existe uma onda térmica e que $\theta^L = \theta^R = 0$. Supondo que existem as ondas de gás e de combustível, como se pode observar na Figura 7 (esquerda), a onda de combustão separa os estados constantes $(0, 1, \rho^M)$ e $(0, Y^N, 1)$. Sabemos que nos estados constantes não pode existir combustão. Observe que no estado $(0, 1, \rho^M)$ existe combustão para $\rho^M \neq 0$, pois $\rho Y \phi > 0$ (contradição). Portanto, $\rho^M = 0$, logo não existe onda de combustível conforme a Figura 7 (centro). De forma análoga, no estado $(0, Y^N, 1)$ se $Y^N \neq 0$ então existe combustão (contradição), assim não existe onda de gás e $Y^N = 0$, veja a Figura 7 (direita).

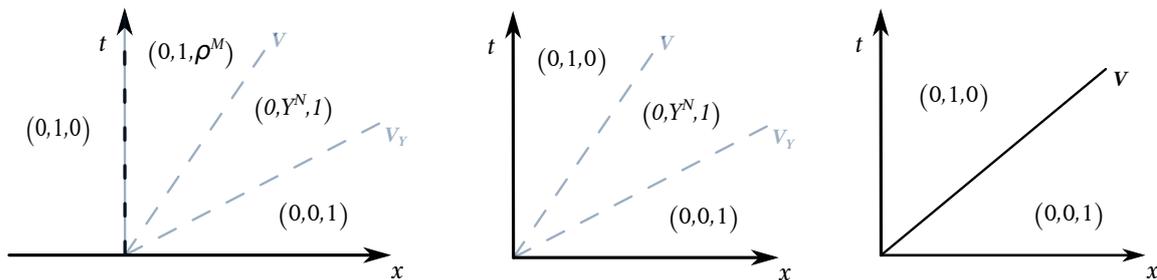


Figura 7 – Leque de Riemann para o Sistema (4.12)-(4.15) representando os estados constantes no espaço (θ, Y, ρ) separados pelas ondas: (esquerda) de combustível estacionária, de combustão com velocidade $v < v_Y$ e de concentração do gás com velocidade v_Y ; (centro) de combustão e de concentração do gás; (direita) de combustão.

□

Observação 5.2. *No caso de considerarmos uma lei de Arrhenius truncada a situação apresentada no Teorema 5.1 seria diferente [1, 10], pois teríamos um estado constante TC. Portanto, poderia existir uma onda de combustível e uma de concentração de gás.*

Em consequência, dos Teoremas 5.1 e 5.2 temos que as sequências de ondas que descrevem as soluções de problemas dos Riemann para o Sistema (4.12)-(4.14) estão formadas por uma única onda de combustão caso exista. Embora, não existam ondas de contato veremos na seguinte seção que v_θ obtido na Observação 5.1 é muito importante no estudo das ondas de combustão do modelo. Uma vez que, seguindo [6] definimos as ondas de combustão com velocidade $v < v_\theta$, $v > v_\theta$ e $v = v_\theta$ como sendo de *onda de combustão lenta*, *onda de combustão rápida* e *onda de combustão de ressonância*, respectivamente.

5.2 ONDAS DE COMBUSTÃO

Nesta seção, para completar a prova do resultado principal deste capítulo dedicaremos nossa atenção na existência das ondas de combustão (que podem ser rápida, lenta ou de ressonância) presentes nas sequências. Para mostrar este resultado precisamos estudar a curva Γ . A seguinte subseção está voltada para a definição e detalhamento de tal conceito.

5.2.1 Curva Γ

Defina a curva Γ como o lugar geométrico onde $\rho(1 - \rho)\phi - \beta\theta$ é zero
 $\Gamma = \{(\rho, \theta) : \rho(1 - \rho) = f(\theta), \theta \geq 0\}$ com $f(\theta) = \beta\theta \exp\left(\frac{\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right)$.

Se $(\rho, \theta) \in \Gamma$, então

$$\rho = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4f(\theta)}}{2}.$$

Examinando a função $f(\theta)$ é possível notar que $f(\theta) \geq 0$, $f(0) = 0$, $\lim_{\theta \rightarrow \infty} f(\theta) = \infty$ e f tem no máximo dois pontos críticos.

Seja θ^c um ponto crítico de f , como

$$f'(\theta) = \beta \exp\left(\frac{\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right) + \beta\theta \left(\frac{-\varepsilon}{(\theta + \theta_0)^2}\right) \exp\left(\frac{\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right),$$

temos

$$f'(\theta^c) = 0 \implies \beta + \beta\theta^c \left(\frac{-\varepsilon}{(\theta^c + \theta_0)^2}\right) = 0 \implies (\theta^c + \theta_0)^2 - \theta^c\varepsilon = 0.$$

Logo,

$$\theta_{\pm}^c = \frac{\varepsilon - 2\theta_0 \pm \sqrt{\varepsilon^2 - 4\varepsilon\theta_0}}{2}.$$

Então, temos 3 casos

Caso 1: $\varepsilon < 4\theta_0 \implies f$ não tem pontos críticos.

Caso 2: $\varepsilon = 4\theta_0 \implies f$ tem um único ponto crítico.

Caso 3: $\varepsilon > 4\theta_0 \implies f$ tem dois pontos críticos.

Considerando ρ como representação das funções ρ_{\pm} dependentes de θ , dadas por

$$\rho_{\pm}(\theta) = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4f(\theta)}}{2},$$

temos

$$\rho'_{\pm}(\theta) = \pm \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{1 - 4f(\theta)}} (-4f'(\theta)) = \pm \frac{f'(\theta)}{\sqrt{1 - 4f(\theta)}}.$$

Observação 5.3. A direção tangente a curva Γ nos equilíbrios é $(\rho_{\pm}, \theta)'|_{\theta=0} = (\pm\beta/e, 1)$. Pois, como $f'(0) = \beta \exp(\varepsilon/\theta_0)$, então $\rho'_{\pm}(0) = \pm\beta/e$ com $e = \exp(-\varepsilon/\theta_0)$.

Portanto:

- a) Os pontos críticos de ρ coincidem com os de f .
- b) Se existe um único θ^l tal que $4f(\theta^l) = 1$, então $\rho'(\theta) \rightarrow \infty$ quando $\theta \rightarrow \theta^l$. Se existem três θ tais que $4f(\theta) = 1$, temos que existem três θ^l tais que $\rho'(\theta) \rightarrow \infty$ quando $\theta \rightarrow \theta^l$.

Nas Figuras 8 e 9, podemos observar os casos 1 e 2 nos quais f é estritamente crescente e existe um único θ_M tal que $4f(\theta_M) = 1$. Na Figura 10, por sua vez, observamos que existem ou um ou três valores de θ tal que $4f(\theta) = 1$.

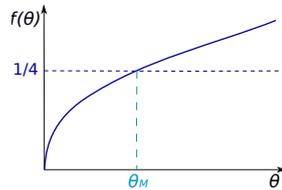


Figura 8 – Caso 1: f é estritamente crescente.

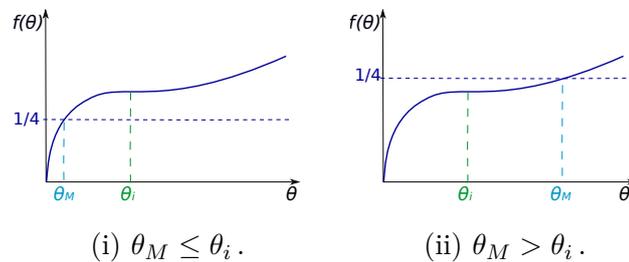


Figura 9 – Caso 2: f tem um ponto de inflexão, θ_i . $f(\theta_M) = 1/4$.

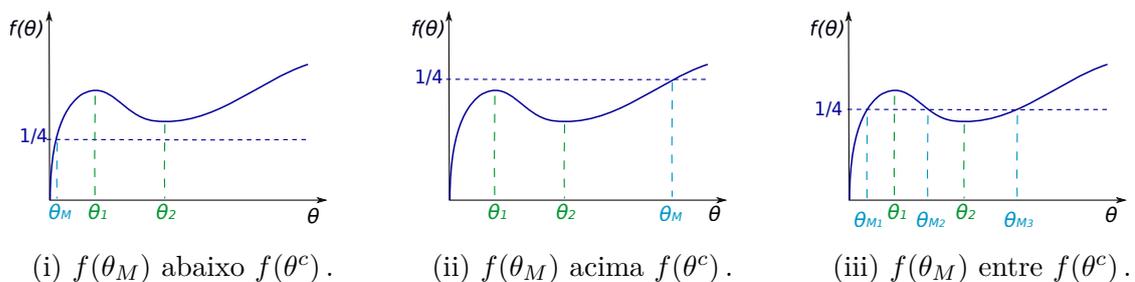


Figura 10 – Caso 3: f tem dois pontos críticos. θ^c pontos críticos de f .

Assim, podemos notar que f pode ser representada de três formas conforme a quantidade de pontos críticos 0, 1 ou 2, como visto nas Figuras 8, 9 e 10. Logo, isto influi na representação de ρ_- e de ρ_+ que dão origem à curva Γ , lugar geométrico onde a componente vertical do campo vetorial do Sistema (5.16)-(5.17) é igual a zero. Observando que o gráfico da função ρ_- é a reflexão do gráfico de ρ_+ gerada através do eixo de reflexão $\rho = 1/2$, então a representação da curva Γ depende da função ρ_+ . Na Figura 11, representamos a única forma da curva Γ para f estritamente crescente sem ponto de inflexão. Pois, se f é estritamente crescente, então ρ_+ apenas pode ser estritamente crescente. Na Figura 12,

vemos que se o gráfico de f tem um ponto de inflexão, ρ_+ pode ser estritamente crescente ou ter um ponto de inflexão, a primeira vale quando θ_M é menor ou igual que θ_i , onde ocorre o ponto de inflexão do gráfico de f ; e a segunda quando θ_M é maior que θ_i . Na Figura 13, podemos observar que para f com dois pontos críticos, se existir algum θ_M tal que $f(\theta_M) = 1/4$, então ρ_+ pode ser (i) continua estritamente crescente quando $f(\theta_M)$ é menor do que o valor de f nos pontos críticos. (ii) continua e ter dois pontos críticos quando $f(\theta_M)$ é maior do que o valor de f nos pontos críticos. (iii) descontinua quando $f(\theta_M)$ está entre os valores de f nos pontos críticos.

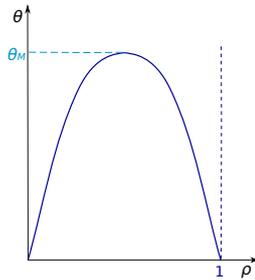
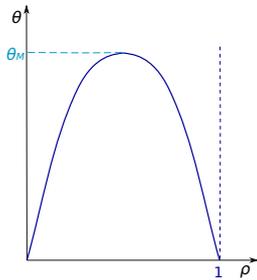
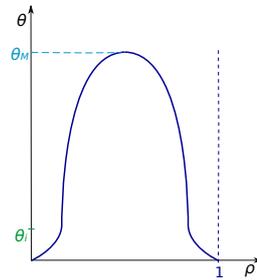


Figura 11 – Caso 1: Curva Γ para ρ_+ é estritamente crescente.

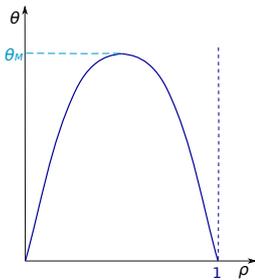


(i) ρ_+ é estritamente crescente.

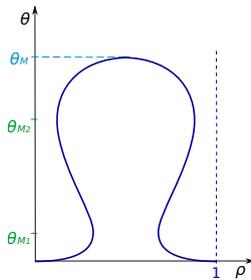


(ii) ρ_+ tem um ponto de inflexão.

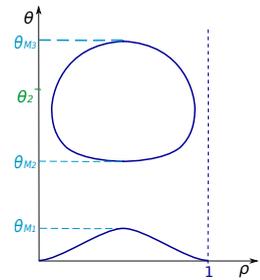
Figura 12 – Caso 2: Curva Γ se f tem um ponto de inflexão.



(i) ρ_+ é estritamente crescente.



(ii) ρ_+ tem dois pontos críticos.



(iii) ρ_+ é descontinua.

Figura 13 – Caso 3: Curva Γ se f tem dois pontos críticos.

Portanto, temos 4 formas de representar a curva Γ no retrato de fase do Sistema (5.16)-(5.17), veja a Figura 14.

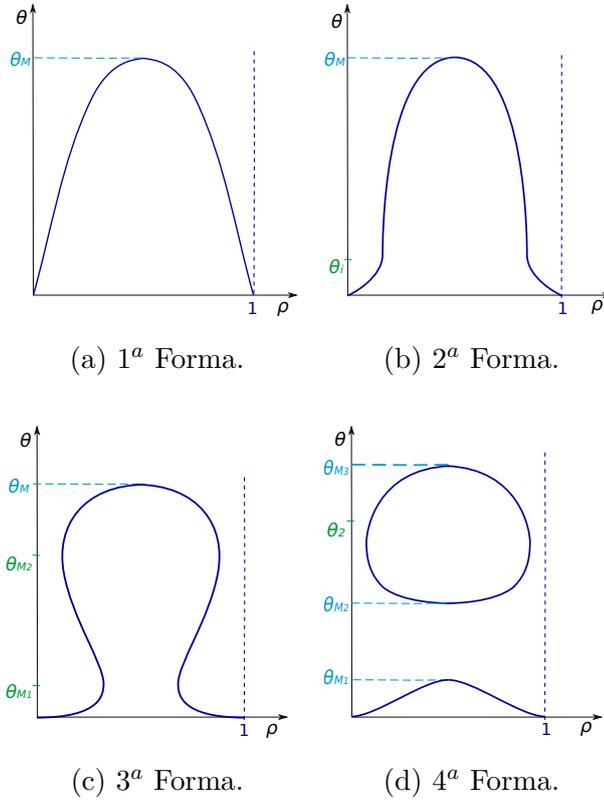


Figura 14 – Representações da curva Γ .

A existência das ondas de combustão é garantida pelo Teorema 5.3. A demonstração deste teorema é por análise de retrato de fase, para isso usamos o comportamento da curva Γ definida na subseção anterior.

Teorema 5.3. *O Sistema (4.12)-(4.14) possui uma onda viajante de combustão nos seguintes casos:*

- I) *Se $v_Y < (\mu_Y + 1)v_\theta$, então existe uma única onda de combustão lenta com velocidade $v < v_\theta$.*
- II) *Se $v_Y > (\mu_Y + 1)v_\theta$, então existe uma única onda de combustão rápida com velocidade $v > v_\theta$.*
- III) *Se $v_Y = (\mu_Y + 1)v_\theta$, então existe uma onda de combustão se, e somente se, existe $\theta_M > 0$ tal que $4f(\theta_M) = 1$ e f é estritamente crescente em $[0, \theta_M]$.*

Em todos os casos, a onda de combustão é do tipo $FC \xrightarrow{v} OC$, onde sua velocidade é dada por $v = \frac{v_Y}{\mu_Y + 1}$.

5.2.2 Demonstração da existência das ondas de combustão

Demonstração do Teorema 5.3. Utilizando coordenadas viajantes $(x, t) \longrightarrow (\xi = x - vt, t)$, onde v é a velocidade da onda viajante, temos que

$$\begin{aligned}\partial_t \theta &= \partial_t \theta \partial_t t + \partial_\xi \theta \partial_t \xi = \partial_t \theta - v \partial_\xi \theta, \\ \partial_x \theta &= \partial_t \theta \partial_x t + \partial_\xi \theta \partial_x \xi = \partial_\xi \theta.\end{aligned}$$

Substituindo em (4.12) segue que:

$$\partial_t \theta - v \partial_\xi \theta + v_\theta \partial_\xi \theta = -\beta \theta + \rho Y \phi.$$

Agora, como procuramos solução estacionária, isto é, $\partial_t \theta = 0$ temos

$$-v \partial_\xi \theta + v_\theta \partial_\xi \theta = -\beta \theta + \rho Y \phi.$$

De maneira análoga reescrevemos as Equações (4.13) e (4.14), o Sistema (4.12)-(4.14) fica da seguinte forma:

$$-v \partial_\xi \theta + v_\theta \partial_\xi \theta = -\beta \theta + \rho Y \phi, \quad (5.10)$$

$$-v \partial_\xi Y + v_Y \partial_\xi Y = -\mu_Y \rho Y \phi, \quad (5.11)$$

$$-v \partial_\xi \rho = -\rho Y \phi. \quad (5.12)$$

Substituindo (5.12) em (5.11), integrando em ξ de $-\infty$ a ∞ e utilizando as condições de fronteira (4.16) temos:

$$-v \partial_\xi Y + v_Y \partial_\xi Y = -\mu_Y v \partial_\xi \rho,$$

$$\partial_\xi (-v Y + v_Y Y + \mu_Y v \rho) = 0,$$

logo,

$$\lim_{\xi \rightarrow -\infty} (-v Y + v_Y Y + \mu_Y v \rho) = \lim_{\xi \rightarrow \infty} (-v Y + v_Y Y + \mu_Y v \rho),$$

ou seja,

$$-v Y^L + v_Y Y^L + \mu_Y v \rho^L = -v Y^R + v_Y Y^R + \mu_Y v \rho^R.$$

Dai,

$$v (Y^R - Y^L) = v_Y (Y^R - Y^L) + \mu_Y v (\rho^R - \rho^L),$$

donde se obtém que,

$$v = \frac{v_Y (Y^R - Y^L)}{(Y^R - Y^L) - \mu_Y (\rho^R - \rho^L)}.$$

Agora, considerando $FC \xrightarrow{v} OC$, isto é, $(Y^L, \rho^L) = (1, 0)$ e $(Y^R, \rho^R) = (0, 1)$ temos que

$$v = \frac{v_Y}{\mu_Y + 1}. \quad (5.13)$$

Observe que esta fórmula permite classificar a velocidade da onda de combustão que

aparece no enunciado do Teorema (5.3). Substituindo (5.12) em (5.11), integrando de ξ à condição de fronteira em $\xi \rightarrow \infty$, obtemos

$$\begin{aligned} -v \partial_\xi Y + v_Y \partial_\xi Y &= -\mu_Y v \partial_\xi \rho, \\ \partial_\xi(-v Y + v_Y Y + \mu_Y v \rho) &= 0, \\ -v Y + v_Y Y + \mu_Y v \rho &= cte, \\ -v Y + v_Y Y + \mu_Y v \rho &= \lim_{\xi \rightarrow \infty} (-v Y + v_Y Y + \mu_Y v \rho), \end{aligned} \tag{5.14}$$

Usando a Equação (5.13) obtemos

$$\begin{aligned} -\frac{v_Y}{\mu_Y + 1} Y + v_Y Y + \mu_Y \frac{v_Y}{\mu_Y + 1} \rho &= -v Y^R + v_Y Y^R + \mu_Y v \rho^R, \\ \frac{-v_Y + v_Y(1 + \mu_Y)}{1 + \mu_Y} Y + \frac{\mu_Y v_Y}{1 + \mu_Y} \rho &= \mu_Y \frac{v_Y}{1 + \mu_Y}, \\ \frac{v_Y \mu_Y}{1 + \mu_Y} Y &= \frac{\mu_Y v_Y}{1 + \mu_Y} (1 - \rho), \\ Y &= 1 - \rho. \end{aligned} \tag{5.15}$$

Logo, usando (5.12) e (5.15) em (5.14) obtemos

$$\begin{aligned} -v \partial_\xi(1 - \rho) + v_Y \partial_\xi(1 - \rho) &= \mu_Y \rho Y \phi, \\ v \partial_\xi \rho - v(v_Y + 1) \partial_\xi \rho &= -\mu_Y \rho(1 - \rho) \phi, \\ v \partial_\xi \rho(1 - \mu_Y - 1) &= -\mu_Y \rho(1 - \rho) \phi, \\ \partial_\xi \rho &= \frac{\rho(1 - \rho) \phi}{v}. \end{aligned}$$

Assim, o Sistema (5.10)-(5.12) em coordenadas viajantes pode ser reescrito como um sistema de EDOs:

$$\partial_\xi \rho = \rho(1 - \rho) \frac{\phi}{v}, \tag{5.16}$$

$$(v_\theta - v) \partial_\xi \theta = \rho(1 - \rho) \phi - \beta \theta. \tag{5.17}$$

Primeiro considerando o caso $v_\theta \neq v$, obtemos

$$\partial_\xi \rho = \rho(1 - \rho) \frac{\phi}{v}, \tag{5.18}$$

$$\partial_\xi \theta = \frac{\rho(1 - \rho) \phi - \beta \theta}{v_\theta - v}. \tag{5.19}$$

O Sistema (5.18)-(5.19) pode ser escrito como $X' = F(X) = (F_1(X), F_2(X))$ com $X = (\rho, \theta)$, $F_1(X) = \rho(1 - \rho) \phi / v$ e $F_2(X) = (\rho(1 - \rho) \phi - \beta \theta) / (v_\theta - v)$.

Calculo da matriz jacobiana do Sistema (5.18)-(5.19).

$$\frac{\partial F_1}{\partial \rho} = \partial_\rho \left(\frac{\rho(1-\rho)}{v} \exp\left(\frac{-\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right) \right) = \frac{1-2\rho}{v} \phi,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1}{\partial \theta} &= \partial_\theta \left(\frac{\rho(1-\rho)}{v} \exp\left(\frac{-\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right) \right) = \frac{\rho(1-\rho)}{v} (-\varepsilon) \left(-\frac{1}{(\theta + \theta_0)^2} \right) \exp\left(\frac{-\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right) \\ &= \frac{\rho(1-\rho)}{v} \frac{\varepsilon}{(\theta + \theta_0)^2} \exp\left(\frac{-\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right), \end{aligned}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \rho} = \partial_\rho \left(\frac{1}{v_\theta - v} (\rho(1-\rho)\phi - \beta\theta) \right) = \frac{1}{v_\theta - v} (1-2\rho)\phi,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_2}{\partial \theta} &= \partial_\theta \left(\frac{1}{v_\theta - v} (\rho(1-\rho) \exp\left(\frac{-\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right) - \beta\theta) \right) \\ &= \frac{1}{v_\theta - v} \left(\rho(1-\rho) (-\varepsilon) \left(-\frac{1}{(\theta + \theta_0)^2} \right) \exp\left(\frac{-\varepsilon}{\theta + \theta_0}\right) - \beta \right) \\ &= \frac{1}{v_\theta - v} \left(\rho(1-\rho) \frac{\varepsilon}{(\theta + \theta_0)^2} \phi - \beta \right). \end{aligned}$$

Assim a linearização do Sistema (5.18)-(5.19) no ponto (ρ, θ) produz a matriz

$$DF = DF(\rho, \theta) = \begin{pmatrix} \frac{1-2\rho}{v} \phi & \frac{\rho(1-\rho)\varepsilon}{(\theta + \theta_0)^2 v} \phi \\ \frac{1-2\rho}{v_\theta - v} \phi & \frac{1}{v_\theta - v} \left(\frac{\rho(1-\rho)\varepsilon}{(\theta + \theta_0)^2} \phi - \beta \right) \end{pmatrix}.$$

Dos Lemas 5.1 e 5.2 segue que se $v < v_\theta$, então o equilíbrio FC é sela e OC é sumidouro. No caso $v > v_\theta$, então o equilíbrio FC é fonte e OC é sela.

Para concluir a demonstração da existência e unicidade das ondas de combustão analisamos o retrato de fase (ρ, θ) do Sistema (5.16)-(5.17) para os casos de combustão lenta $v < v_\theta$, rápida ($v > v_\theta$) e de ressonância ($v = v_\theta$) nas Proposições 5.1, 5.2 e 5.3, respectivamente.

□

Lema 5.1. *Se $v > v_\theta$, então o equilíbrio FC da matriz jacobiana de (5.18)-(5.19) é fonte e o equilíbrio OC é sela.*

Demonstração.

No equilíbrio OC a matriz jacobiana do Sistema (5.18)-(5.19) é:

$$DF_{OC} = DF(1, 0) = \begin{pmatrix} -\frac{e}{v} & 0 \\ -\frac{e}{v_\theta - v} & \frac{-\beta}{v_\theta - v} \end{pmatrix}.$$

No equilíbrio FC a matriz é:

$$DF_{FC} = DF(0,0) = \begin{pmatrix} \frac{e}{v} & 0 \\ \frac{e}{v_\theta - v} & \frac{-\beta}{v_\theta - v} \end{pmatrix}, \quad e = \exp\left(\frac{-\varepsilon}{\theta_0}\right).$$

Agora, calcularemos os autovalores e autovetores para DF_{OC} e para DF_{FC} :

▷ Para DF_{OC} ,

$$\det \begin{pmatrix} -\frac{e}{v} - \lambda & 0 \\ -\frac{e}{v_\theta - v} & \frac{-\beta}{v_\theta - v} - \lambda \end{pmatrix} = \left(\frac{e}{v} + \lambda\right)\left(\frac{\beta}{v_\theta - v} + \lambda\right) = 0.$$

Então, $\lambda_{OC}^1 = -\frac{e}{v}$ e $\lambda_{OC}^2 = \frac{\beta}{v - v_\theta}$.

Autovetor de λ_{OC}^1 ,

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{e}{v_\theta - v} & \frac{-\beta v + e(v_\theta - v)}{v(v_\theta - v)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Logo,

$$\begin{aligned} -\frac{e}{v_\theta - v}x + \frac{-\beta v + e(v_\theta - v)}{v(v_\theta - v)}y &= 0, \\ x &= \frac{-\beta v + e(v_\theta - v)}{v(v_\theta - v)} \frac{v_\theta - v}{e}y, \\ x &= \frac{-\beta v + e(v_\theta - v)}{ev}y. \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\beta}{e} + \frac{v_\theta - v}{v} \\ 1 \end{pmatrix} y \quad \Rightarrow \quad V_{OC}^1 = \begin{pmatrix} -\frac{\beta}{e} + \frac{v_\theta - v}{v} \\ 1 \end{pmatrix} y.$$

Logo,

$$\begin{aligned} \lambda_{OC}^1 &= -\frac{e}{v}, & V_{OC}^1 &= \left[\frac{v_\theta - v}{v} - \frac{\beta}{e}, 1 \right]^T; \\ \lambda_{OC}^2 &= \frac{\beta}{v - v_\theta}, & V_{OC}^2 &= [0, 1]^T. \end{aligned}$$

▷ Para DF_{FC} , analogamente obtemos:

$$\lambda_{FC}^1 = \frac{e}{v}, \quad V_{FC}^1 = \left[\frac{v_\theta - v}{v} + \frac{\beta}{e}, 1 \right]^T;$$

$$\lambda_{FC}^2 = \frac{\beta}{v - v_\theta}, \quad V_{FC}^2 = [0, 1]^T.$$

Portanto, $\lambda_{OC}^1 < 0$ e $\lambda_{FC}^1 > 0$, $\forall v \neq v_\theta$. Além disso, como $v > v_\theta$ segue que $\lambda_{OC}^2 > 0$ e $\lambda_{FC}^2 > 0$. Em consequência, FC é fonte e OC é sela. \square

Lema 5.2. *Se $v < v_\theta$, então o equilíbrio FC da matriz jacobiana de (5.18)-(5.19) é sela e o equilíbrio OC é sumidouro.*

Demonstração.

Analogamente ao Lema 5.1, temos que $\lambda_{OC}^1 < 0$ e $\lambda_{FC}^1 > 0$, $\forall v \neq v_\theta$. Além disso, dado que $v < v_\theta$ segue que $\lambda_{OC}^2 < 0$ e $\lambda_{FC}^2 < 0$.

Portanto, FC é sela e OC é sumidouro. \square

A continuação apresentaremos três proposições, as quais são necessárias para concluir a demonstração do Teorema 5.3.

Proposição 5.1. *Existe uma única solução na forma de onda viajante de combustão lenta ($v < v_\theta$) para o Sistema (4.12)-(4.15).*

Demonstração. Como $v < v_\theta$ então pelo Lema 5.2 temos que o equilíbrio OC é um sumidouro e FC é uma sela. Logo, a única onda de combustão possível é $FC \xrightarrow{v} OC$. Vamos analisar o retrato de fase no espaço (ρ, θ) . A componente horizontal do campo vetorial de (5.18)-(5.19) é estritamente positiva entre as linhas $\rho = 0$ e $\rho = 1$, que são variedades invariantes para este campo. A componente vertical $F_2(\rho, \theta) = \partial_\xi \theta = (\rho(1 - \rho)\phi - \beta\theta)/(v_\theta - v)$ do campo vetorial de (5.18)-(5.19) muda de sinal segundo o numerador $\rho(1 - \rho)\phi - \beta\theta$ que define a curva Γ , veja a Subseção 5.2.1. Na Figura 15, apresentamos o retrato de fase para combustão lenta.

Dado que o autovalor λ_{FC}^1 em FC é positivo, pelo Teorema da Variedade Estável, [32], existe uma variedade instável (órbita instável que representa a onda de combustão lenta) tangente a seu autovetor correspondente $V_{FC}^1 = [(v_\theta - v)/v + \beta/e, 1]^T$. Logo, como V_{FC}^1 tem inclinação menor do que a direção tangente à curva Γ no equilíbrio FC dada por $(\beta/e, 1)$, temos que parte da órbita que sai de FC permanece no interior da região Ω onde a componente vertical do campo é positiva. Esta órbita cruza Γ em algum ponto P uma vez que Ω é compacta. A órbita que começa em P é atraída para o sumidouro OC já que fora de Ω a componente vertical do campo é negativa. Isso prova a existência da

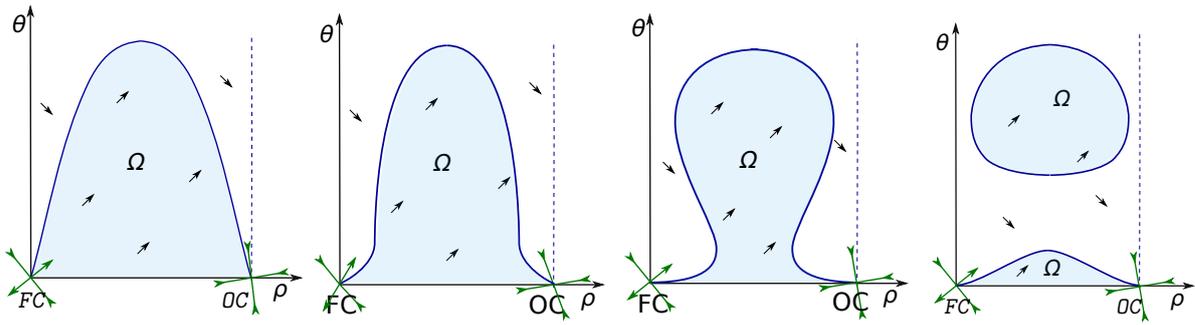


Figura 15 – Retrato de fase do Sistema (5.18)-(5.19) para $v < v_\theta$ com os equilíbrios e cada uma das 4 formas de Γ descritas na Subseção 5.2.1.

órbita que sai de FC e atinge OC . A unicidade decorre da unicidade local da variedade estável. \square

Proposição 5.2. *Existe uma única solução na forma de onda viajante de combustão rápida ($v > v_\theta$) para o Sistema (4.12)-(4.15).*

Demonstração. Para $v > v_\theta$ pelo Lema 5.1 o equilíbrio FC é uma fonte e OC é uma sela. Daí, neste caso a única onda de combustão possível é $FC \xrightarrow{v} OC$. Analogamente ao caso de combustão lenta, a componente horizontal do campo vetorial de (5.18)-(5.19) é estritamente positiva entre as variedades invariantes $\rho = 0$ e $\rho = 1$. A componente vertical do campo vetorial de (5.18)-(5.19) muda de sinal segundo o numerador $\rho(1 - \rho)\phi - \beta\theta$ que define a curva Γ , veja a Subseção 5.2.1. Na Figura 16, apresentamos o retrato de fase para combustão rápida.

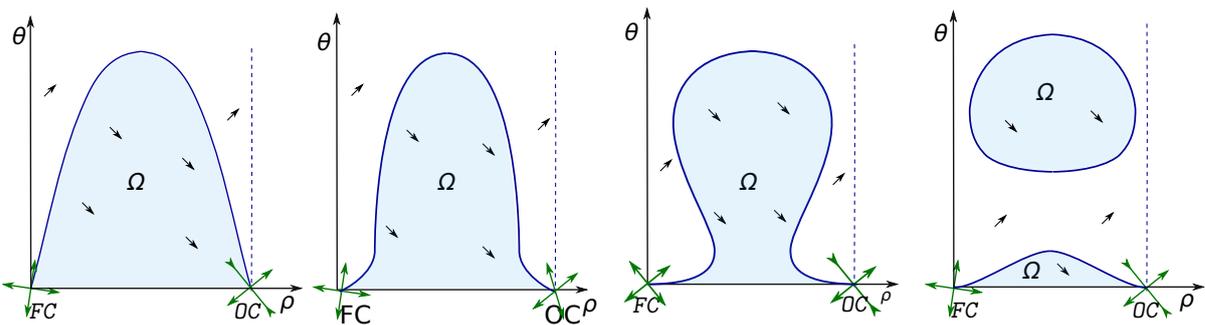


Figura 16 – Retrato de fase do Sistema (5.18)-(5.19) para $v > v_\theta$ com os equilíbrios e cada uma das 4 formas de Γ descritas na Subseção 5.2.1.

Como o autovalor λ_{OC}^1 no equilíbrio OC é negativo pelo Teorema da Variedade Estável, [32], existe uma variedade estável (órbita estável que representa onda de combustão rápida) tangente a seu autovetor correspondente $V_{OC}^1 = [(v_\theta - v)/v - \beta/e, 1]^T$. Logo, dado que V_{OC}^1 tem inclinação negativa menor do que a direção tangente à curva Γ no equilíbrio OC dada por $(-\beta/e, 1)$ temos que parte da órbita estável que atinge OC permanece no

interior da região Ω onde a componente vertical do campo é negativa. Esta variedade cruza Γ em algum ponto P , já que Ω é compacta. A órbita que cruza P é atraída para a fonte FC em tempo negativo dado que fora de Ω a componente vertical do campo é positiva. Isso prova a existência da órbita heteroclínica que atinge OC saindo de FC . A unicidade desta órbita decorre da unicidade local da variedade estável. \square

Proposição 5.3. *Para o caso de ressonância ($v = v_\theta$), existe uma onda de combustão se, e somente se, existe $\theta_M > 0$ tal que $4f(\theta_M) = 1$ e f seja estritamente crescente em $[0, \theta_M]$.*

Demonstração. Para o caso $v = v_\theta$ do Sistema (5.16)-(5.17), lembrando que $f(\theta) = \beta\theta/\phi(\theta)$, obtemos

$$\partial_\xi \rho = \frac{\rho(1-\rho)\phi}{v}, \quad (5.20)$$

$$f(\theta) = \rho(1-\rho). \quad (5.21)$$

Asumindo que f seja injetiva, temos que $\theta = f^{-1}(\rho(1-\rho))$. Daí, usando a expressão de ϕ em (4.15) a Equação (5.20) fica

$$\partial_\xi \rho = \frac{\rho(1-\rho)}{v} \exp\left(\frac{-\varepsilon}{f^{-1}(\rho(1-\rho)) + \theta_0}\right). \quad (5.22)$$

Dado que segundo a Subseção 5.2.1, a função f é injetiva no casos 1, 2 (i) e 2 (ii) para todo θ e nos casos 3 (i) e 3 (iii) para $\theta < \theta_{M1}$ onde θ_{M1} é o menor θ tal que $4f(\theta) = 1$, segue que $\partial_\xi \rho$ está bem definida nesses casos. Assim a curva Γ neste caso, pode ser apenas da 1ª, 2ª e 4ª forma dadas na Figura 14. Note que neste caso a Equação (5.20) é uma EDO ao longo da curva Γ definida pela Equação (5.21) e os equilíbrios FC e OC satisfazem (5.20)-(5.21). Assim, temos que uma órbita que inicia em Γ é uma curva continua Γ_c (contida em Γ) que conecta os equilíbrios FC e OC , e pela Equação (5.20) temos que a componente horizontal do fluxo é positiva ao longo de Γ_c mostrando que tal órbita parte de FC e chega em OC . A unicidade de Γ_c segue da unicidade de Γ . Na Figura 17, apresentamos a curva Γ_c que representa a onda de combustão de ressonância.

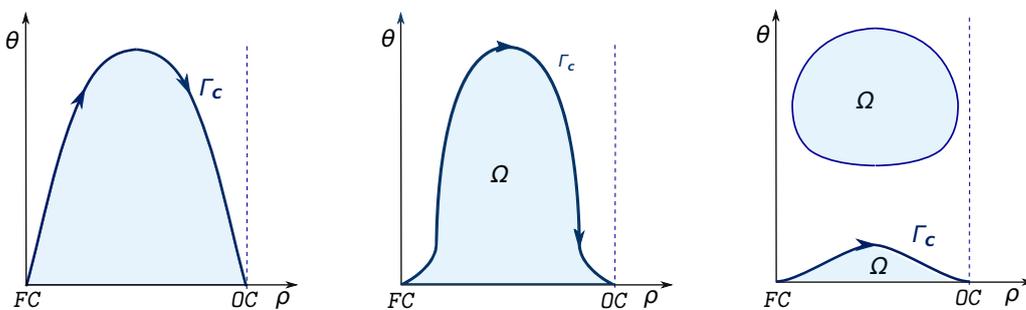


Figura 17 – Retrato de fase do Sistema (5.20)-(5.21) para $v = v_\theta$ com os equilíbrios e a 1ª, 2ª e 4ª das formas de Γ obtidas na Subseção 5.2.1.

Observação 5.4. *Para a 2ª forma de Γ apresentada na Subseção 5.2.1 correspondente ao caso da existência de um único ponto de inflexão do gráfico de f e $\theta_M > \theta_i$, na prova de Proposição 5.3 obtivemos uma única onda viajante de ressonância que tem um perfil com uma singularidade interna, veja a definição de singularidade interna em [3]. Observe que tal singularidade, que se pode observar na Figura 17 (centro) onde a inclinação de θ em função de ρ é infinita, não nos impediu de mostrar a existência da onda viajante. Este tipo de ondas frequentemente são chamadas de ondas viajantes singulares [3] e existem trabalhos inteiros focados nesse tipo de ondas, porém em poucos trabalhos se estudam os seus aspectos teóricos [3, 20, 21]. Este tipo de ondas são importantes em modelos de recuperação avançada de óleo por injeção de ar [30]. Um exemplo é o modelo para combustão in-situ apresentado neste trabalho. Essas ondas também são encontradas em problemas de detonação [15, 24] e em outros problemas de matemática [3].*

No seguinte capítulo na Figura 20 evidenciaremos numericamente este fato.

6 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Neste capítulo apresentaremos alguns exemplos que validam numericamente os resultados teóricos obtidos no Capítulo 5. Logo, a partir desses resultados pretendemos obter alguma informação a respeito do modelo mais geral apresentado neste trabalho que é dado no Capítulo 4. O modelo mais geral para combustão in-situ apresentado neste trabalho é representado pelo sistema de EDPs (4.7)-(4.9) no qual considera os termos de difusão diferentes de zero. No entanto, a teoria desenvolvida no Capítulo 5 foi dada para o Sistema (4.12)-(4.14), uma simplificação do modelo geral apresentado neste trabalho, no qual os termos de difusão são desprezados. Este sistema corresponde diretamente com o sistema de EDOs (5.16)-(5.17) conforme a Subseção 5.2.2. Vale ressaltar que até agora, não foi estudado o problema geral apresentado neste trabalho, contudo têm sido abordadas algumas simplificações do modelo, por exemplo temos os artigos revisados no Capítulo 3.

Os resultados apresentados neste capítulo, foram obtidos mediante duas abordagens numéricas: na primeira foi aplicado o esquema de diferenças finitas Crank-Nicolson diretamente ao sistema de EDPs (4.7)-(4.9) no qual $\lambda_\theta \neq 0$ e $\lambda_Y \neq 0$; e na segunda foi aplicado o método de Runge-Kutta ao sistema de EDOs (5.16)-(5.17) no qual $\lambda_\theta = \lambda_Y = 0$. Assim, as respectivas soluções numéricas de ambos sistemas, no melhor dos casos, deveriam ser próximas. Pois, segundo [39] temos que todo método numérico de diferenças finitas, em particular o esquema de Crank-Nicolson, pode conter pequenas oscilações que influenciam a precisão da solução.

O esquema de Crank-Nicolson utilizado nas simulações deste capítulo foi implementado em [27] na linguagem de programação C. O método de Runge-Kutta utilizado nas simulações é próprio do MATLAB. Para os casos de combustão lenta e rápida usamos a função “ode45”. Para combustão de ressonância utilizamos a função “ode23t” pois neste caso temos um sistema de equações algébrico-diferenciais, o qual a função “ode45” não resolve.

Note que o sistema de EDPs (4.7)-(4.9) possui 8 parâmetros adimensionais dos quais para toda simulação das duas primeiras seções deste capítulo, fixamos quatro: difusão do oxigênio ($\lambda_Y = 0.1$), velocidade térmica ($v_\theta = 0.1$), coeficiente estequiométrico do oxigênio ($\mu_Y = 1$) e temperatura do reservatório ($\theta_0 = 1$). E mudando os outros quatro: difusão térmica dada por λ_θ ; coeficiente de perdas térmicas dado por β ; velocidade do oxigênio dada por v_Y e energia de ativação dada por ε , conforme indicaremos nas seguintes seções. Para o sistema de EDOs (5.16)-(5.17) manteremos os mesmos valores, com a ressalva de que para este sistema temos considerado $\lambda_\theta = \lambda_Y = 0$.

Na terceira seção deste capítulo também será incluído um exemplo com valores físicos que foram dados na Tabela 1 apresentada no Capítulo 4.

6.1 VALIDAÇÃO DA TEORIA

O objetivo desta seção é mostrar uma solução aproximada da solução analítica do Sistema (4.12)-(4.14) para cada caso descrito no Capítulo 5 que validam os resultados obtidos no capítulo anterior. Observe que para o estudo da teoria nós temos desprezado os termos de difusão.

Segue do Teorema 5.3 que a onda de combustão pode ser lenta, rápida ou de ressonância. Uma vez assumido $v_\theta = 0.1$ consideramos $v_Y = 0.1$ para onda de combustão lenta, $v_Y = 0.3$ para onda de combustão rápida e $v_Y = 0.2$ para combustão de ressonância. Dessa forma, usando a Equação (5.13) obtemos $v = 0.05$, $v = 0.15$ e $v = 0.1$ para onda de combustão lenta, rápida e de ressonância, respectivamente.

Além disso, da Subseção 5.2.1 temos que a curva Γ pode ter 4 formas para cada onda de combustão lenta e rápida, bem como 3 formas para a onda de combustão de ressonância. A curva Γ é o lugar geométrico onde a componente vertical do campo vetorial do sistema de EDOs (5.16)-(5.17) é zero.

A fim de obter toda forma possível da curva Γ , para cada tipo de onda, consideramos os valores sem sentido físico seguintes

- 1ª Forma de Γ com $\varepsilon = 3$, $\beta = 0.005$.
- 2ª Forma de Γ com $\varepsilon = 4$, $\beta = 0.005$.
- 3ª Forma de Γ com $\varepsilon = 6$, $\beta = 0.005$. (Note que no caso de ressonância não temos solução para a 3ª forma de Γ).
- 4ª Forma de Γ com $\varepsilon = 5$, $\beta = 0.023$.

Nas Figuras 18, 19 e 20 exibimos a órbita do sistema de EDOs (5.16)-(5.17) que corresponde à solução do Sistema (4.12)-(4.14) para cada caso. Contudo, vale prestar atenção na 2ª forma de Γ para o caso de ressonância apresentada na Figura 20.

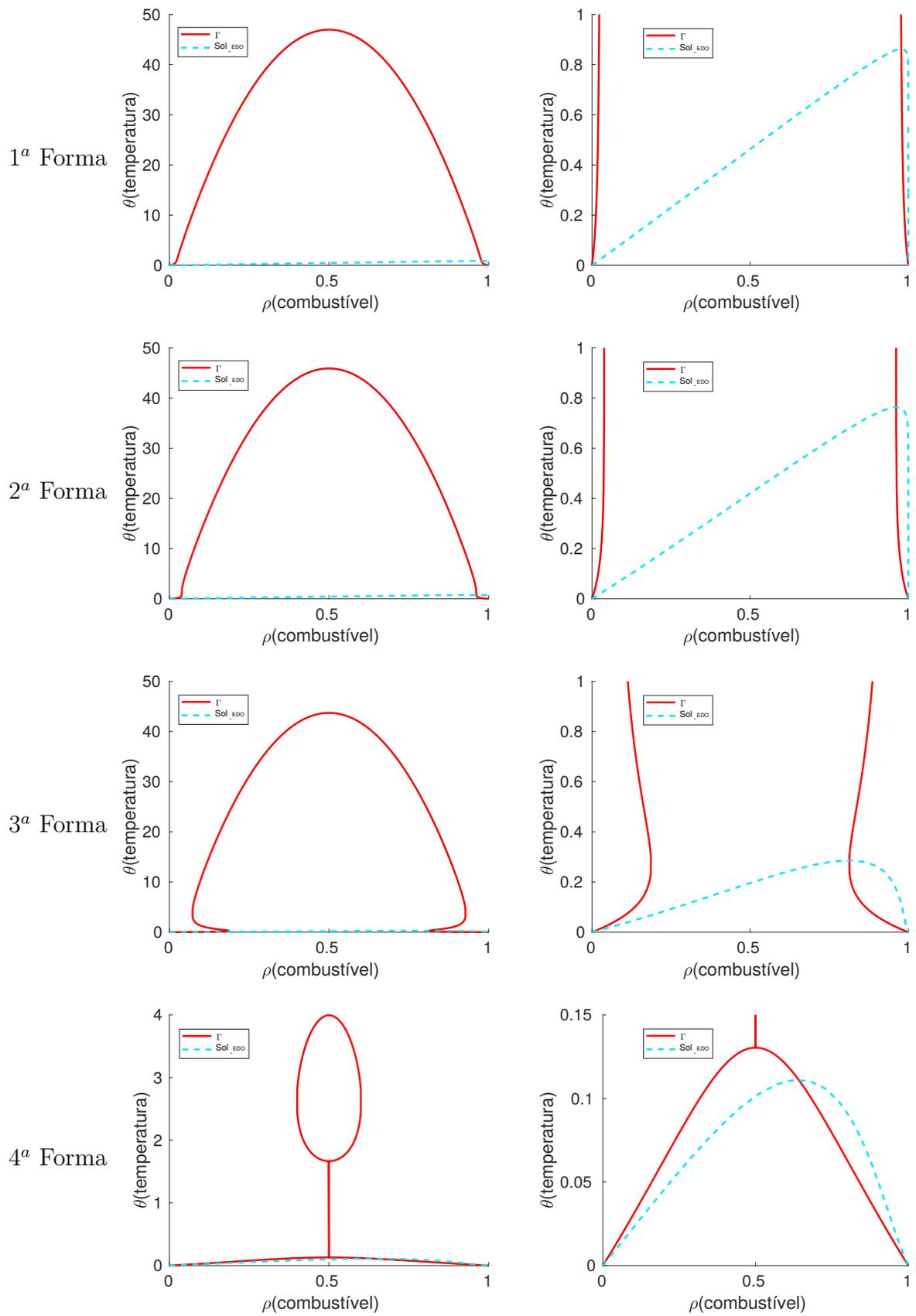


Figura 18 – Combustão lenta ($v < v_{\theta}$): (esquerda) Curva Γ e órbita do sistema de EDOs (5.16)-(5.17); (direita) Vizinhança do eixo $\theta = 0$ ampliada.

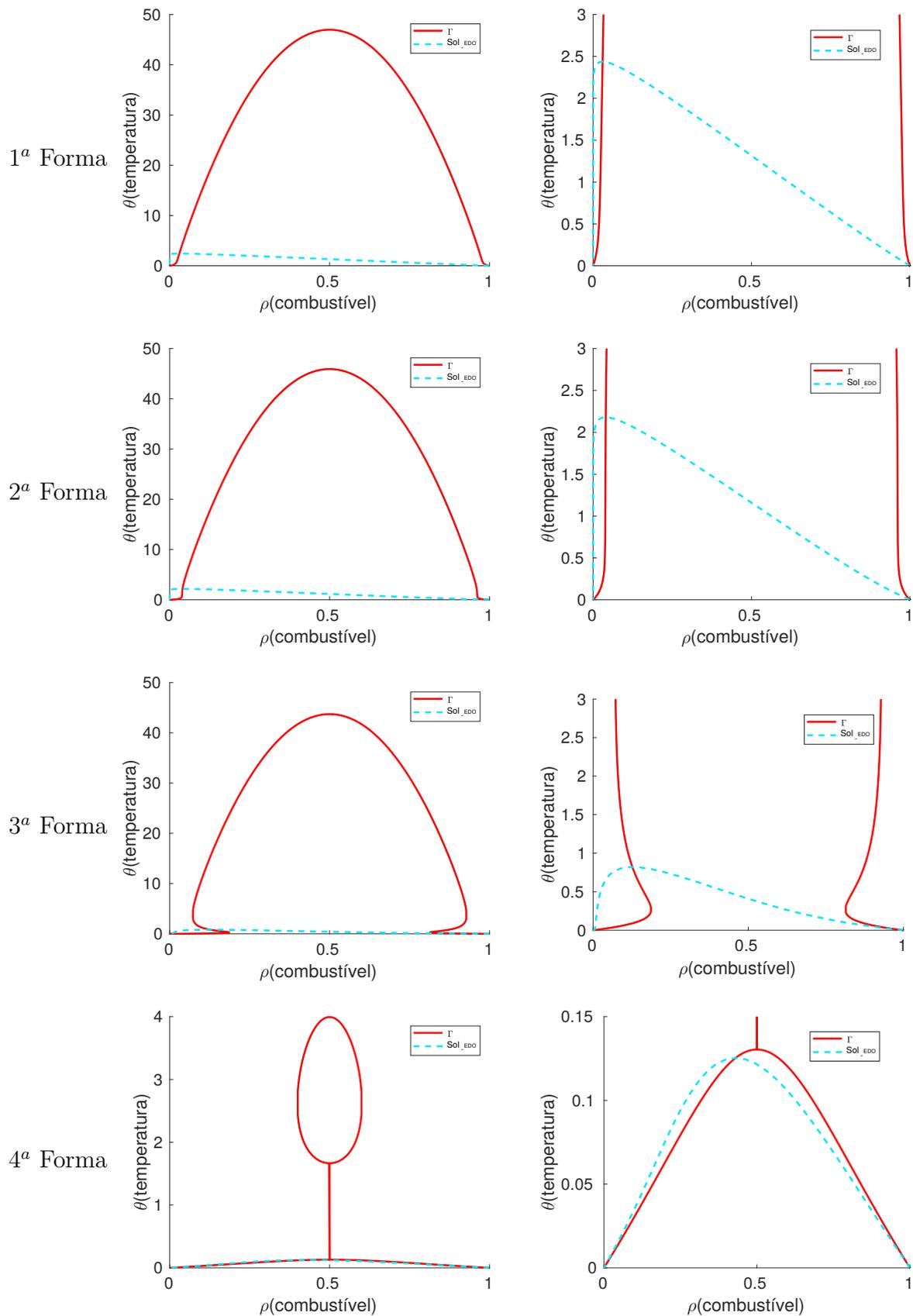


Figura 19 – Combustão rápida ($v > v_\theta$): (esquerda) Curva Γ e órbita do sistema de EDOs (5.16)-(5.17); (direita) Vizinhança do eixo $\theta = 0$ ampliada.

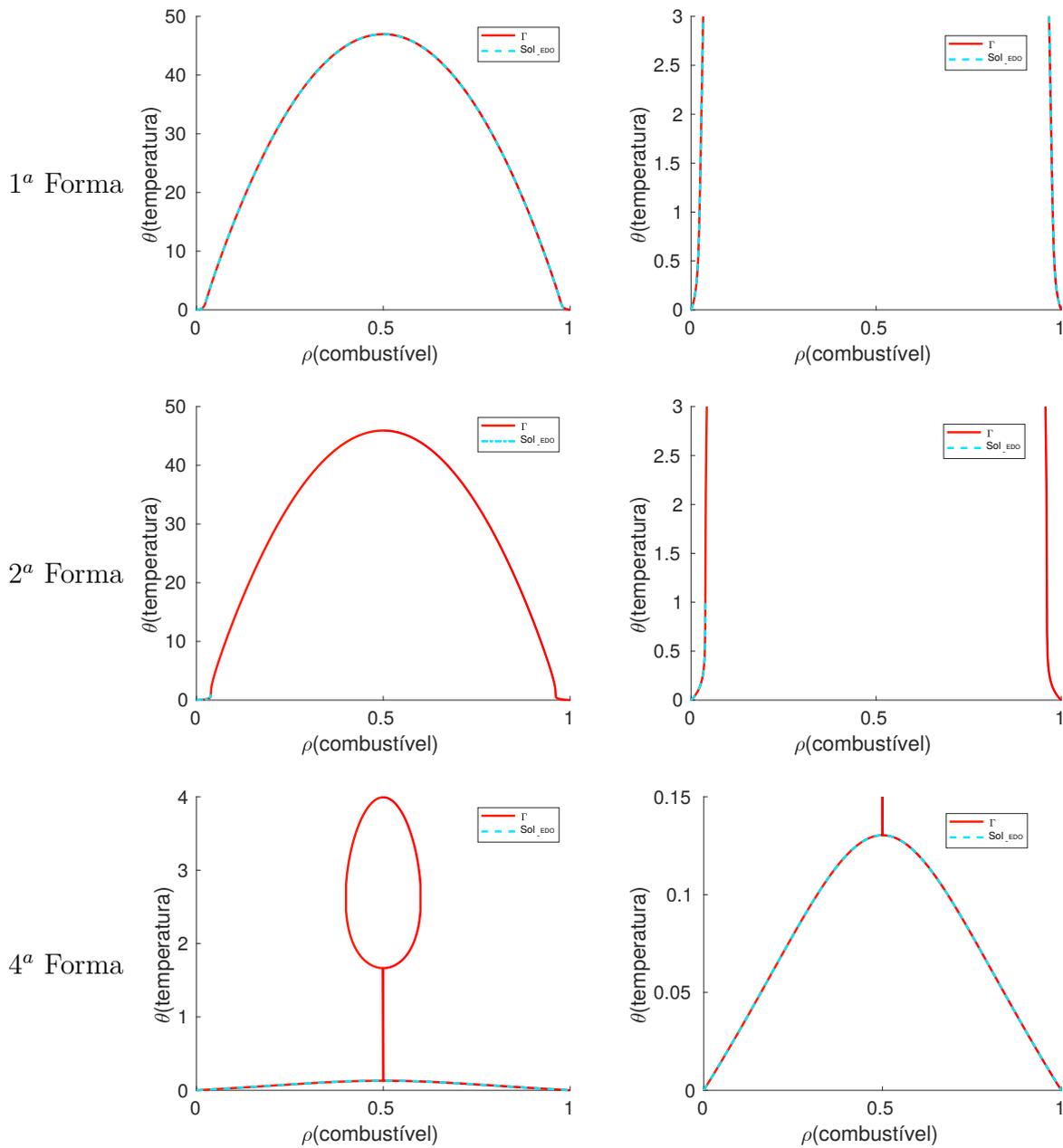


Figura 20 – Combustão de ressonância ($v = v_\theta$): (esquerda) Curva Γ e órbita do sistema de EDOs (5.16)-(5.17) coincidentes; (direita) Vizinhança do eixo $\theta = 0$ ampliada.

A 2ª forma da curva Γ corresponde ao caso 2-(ii) da Subseção 5.2.1, ou seja, quando f possui um ponto de inflexão.

Observe que na Figura 20 para a 2ª forma de Γ , não foi possível obter numericamente a órbita completa do Sistema (5.16)-(5.17) tendo o ponto correspondente a $\theta = 1$ (note que $\rho \neq 0$ e $\rho \neq 1$) como um “equilíbrio”, chamado em [3] de *pseudo-equilíbrio*.

Observando essa figura, pode levar-nos a pensar que a componente horizontal do fluxo do Sistema (5.16)-(5.17) é zero. Isto não é possível, pois da Equação (5.20) temos que os únicos pontos onde essa componente é zero correspondem a $\rho = 0$ e $\rho = 1$. Contudo

a Proposição 5.3 nos garante que existe solução. Tudo isso, se deve ao fato de a órbita ser apenas uma projeção da solução do sistema.

6.2 COMPARAÇÃO DAS SOLUÇÕES

Considerando perdas térmicas e difusão, nesta seção compararemos as soluções numéricas do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) no tempo $t = 3000$ com as soluções aproximadas do Sistema (4.12)-(4.14). Isso, na tentativa de mostrar a convergência das soluções do problema com difusão para a solução do problema sem difusão conforme a difusão tende a zero. O Sistema de EDPs (4.7)-(4.9) está associado ao modelo no qual se considera os termos de difusão diferentes de zero. O Sistema (4.12)-(4.14) está associado ao modelo no qual os termos de difusão são desprezados que corresponde ao sistema de EDOs (5.16)-(5.17).

Uma vez que o método Runge-Kutta foi usado para encontrar a solução do sistema sem difusão (4.7)-(4.9) e o esquema de Crank-Nicolson foi usado para encontrar a solução para o sistema com difusão (4.12)-(4.14), descrevemos a metodologia usada para medir a proximidade entre a solução do sistema sem difusão e a solução do sistema com difusão da seguinte maneira: Tomamos os valores de ρ e θ obtidos tanto para a solução do sistema sem difusão quanto para a solução do sistema com difusão considerando θ como função de ρ , logo como $\rho \in (0, 1)$ interpolamos os valores de θ nos pontos $\rho = [0.02; 0.07; 0.12; 0.17; 0.22; 0.27; 0.32; 0.37; 0.42; 0.47; 0.52; 0.57; 0.62; 0.67; 0.72; 0.77; 0.82; 0.87; 0.92; 0.97]$.

Observação 6.1. *Para toda simulação $v_\theta = 0.1$, $\mu_Y = 1$, $\theta_0 = 1$ são fixos. Considerando $v_Y = 0.1$, $v_Y = 0.3$ e $v_Y = 0.2$ para as ondas de combustão lenta, rápida e de ressonância, respectivamente. Assim como, para cada tipo de onda tomamos: $\varepsilon = 3$ com $\beta = 0.005$ para a 1ª forma de Γ , $\varepsilon = 4$ com $\beta = 0.005$ para a 2ª forma de Γ , $\varepsilon = 6$ com $\beta = 0.005$ para a 3ª forma de Γ e $\varepsilon = 5$ com $\beta = 0.023$ para a 4ª forma de Γ . Notando que no caso de ressonância não temos solução para a 3ª forma de Γ .*

Para o sistema com difusão consideramos $\lambda_Y = 0.1$ e variamos os valores de λ_θ conforme indicamos ao longo desta seção.

6.2.1 Análise da difusão térmica

As simulações feitas variando a difusão do gás, que não incluímos neste trabalho porque já contém muitas simulações, nos conduziram a soluções com grandes oscilações numéricas. Dessa forma, para $\Delta x = 1$ escolhemos fixar $\lambda_Y = 0.1$ e mudar λ_θ para analisar se diminuindo a difusão térmica obtemos que a solução do sistema com difusão seja mais próxima da solução do sistema sem difusão.

6.2.1.1 Onda de combustão lenta

Para o caso de combustão lenta, na Figura 21 consideramos os valores dos parâmetros dados na Observação 6.1 para comparar a solução do sistema sem difusão e a solução do sistema com difusão para $\lambda_\theta = 0.1$.

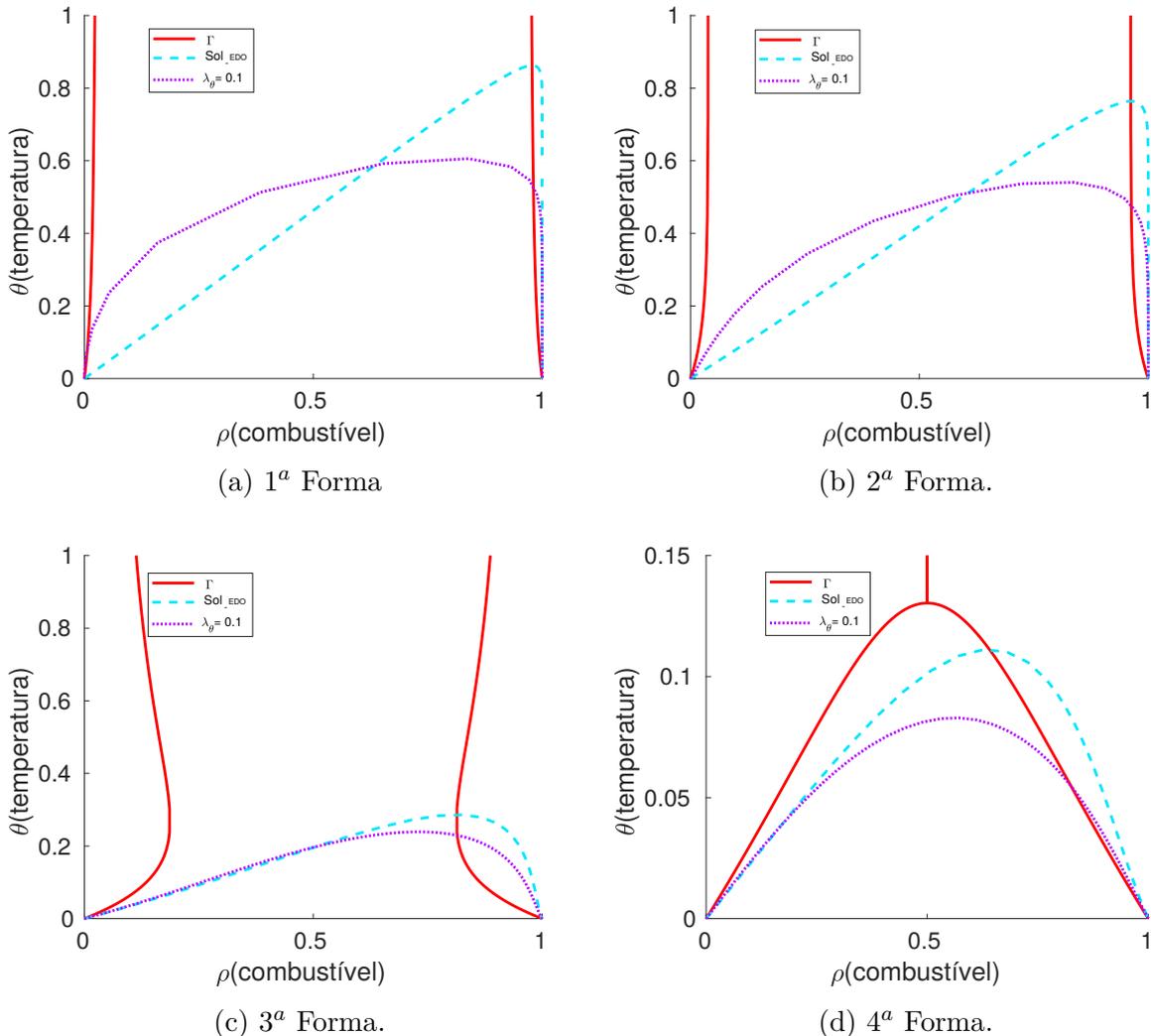


Figura 21 – Onda de combustão lenta ($v < v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão.

Na Figura 21, podemos observar que a solução do sistema sem difusão e a solução do sistema com difusão para $\lambda_\theta = 0.1$ são qualitativamente iguais e próximas. Agora, a partir dos resultados obtidos na Figura 21 estudaremos o comportamento das soluções do sistema com difusão, com respeito à solução do sistema sem difusão, conforme a difusão térmica diminui.

Na Figura 22, comparamos essas soluções com a solução do sistema sem difusão. Dessa forma, para o caso de combustão lenta concluímos que diminuindo λ_θ a solução do Sistema (4.7)-(4.9) converge para a solução de (5.16)-(5.17).

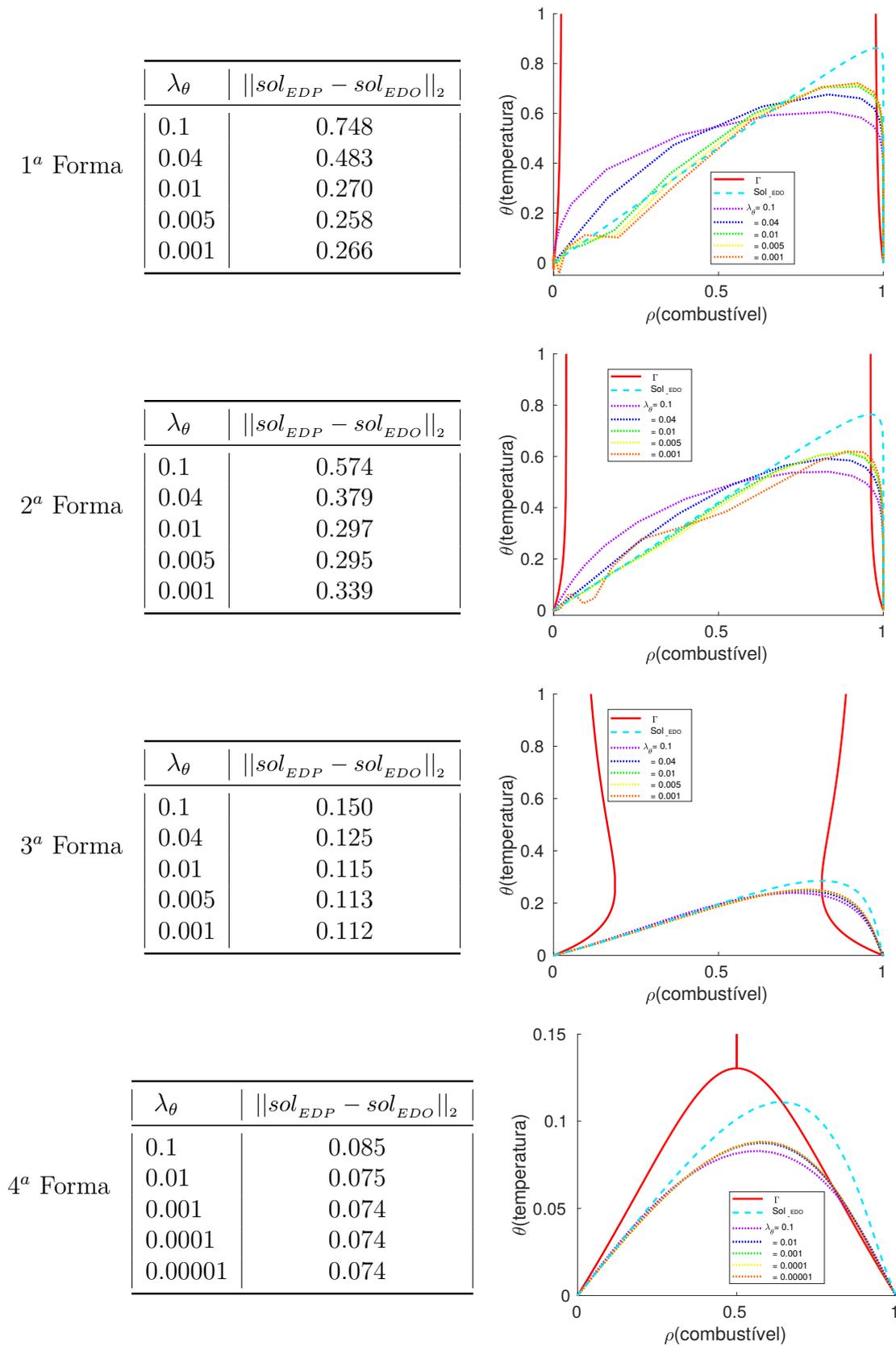


Figura 22 – Combustão lenta ($v < v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão conforme varia λ_θ .

6.2.1.2 Onda de combustão rápida

Para o caso de combustão rápida, na Figura 23 consideramos os valores dos parâmetros dados na Observação 6.1 para comparar a solução do sistema sem difusão e a solução do sistema com difusão para $\lambda_\theta = 0.1$ e observamos que neste caso a temperatura toma valores mais altos que no caso de combustão lenta.

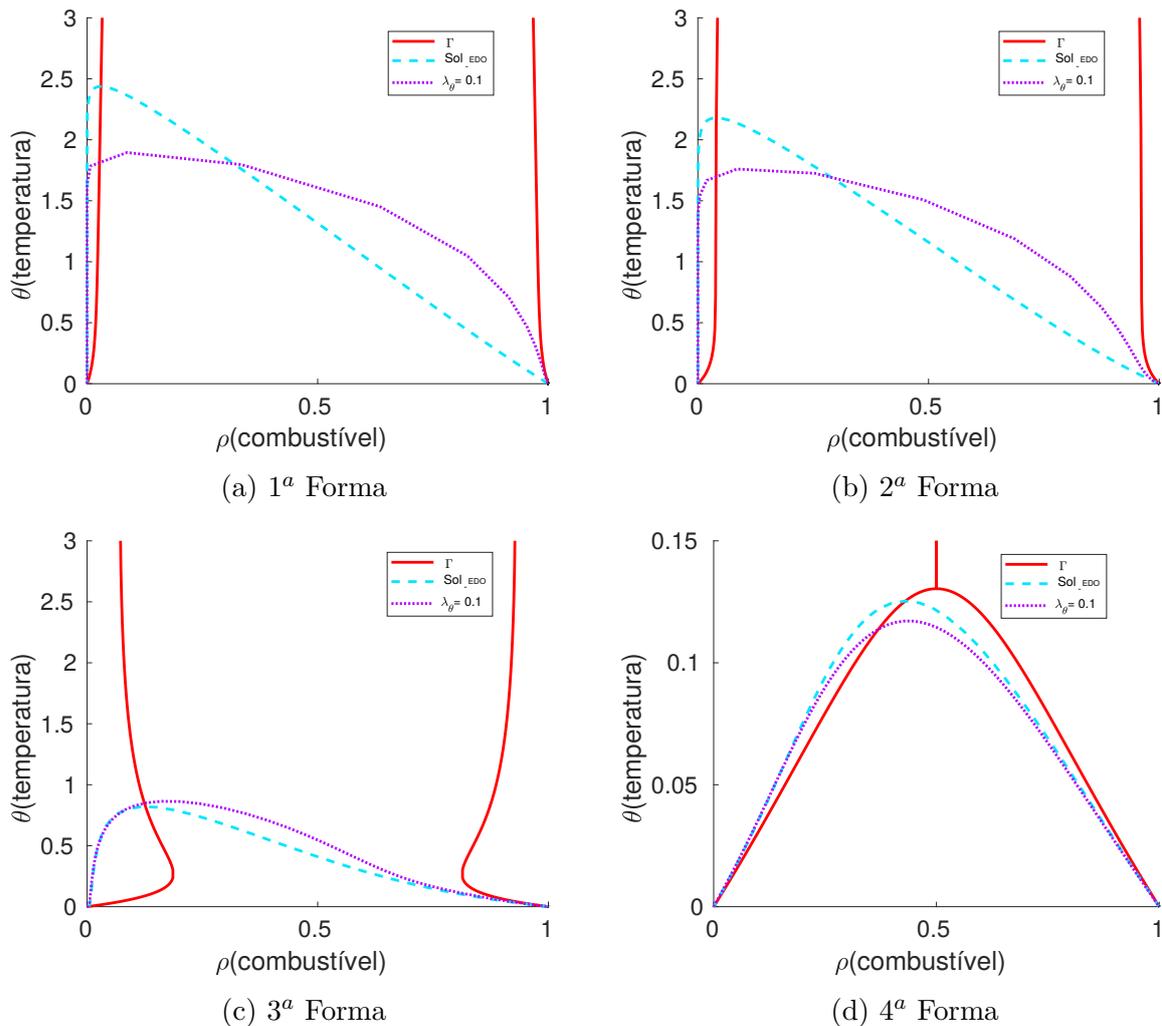


Figura 23 – Combustão rápida ($v > v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão.

Na Figura 23, podemos observar que a solução do sistema sem difusão e a solução do sistema com difusão para $\lambda_\theta = 0.1$ mantêm o mesmo aspecto qualitativo como no caso de combustão lenta.

Agora, novamente variamos a difusão térmica e apresentamos estes resultados na Figura 24 observando que neste caso não há oscilação numérica significativa comparada com o do caso de combustão lenta. Concluimos também que diminuindo λ_θ teremos convergência da solução do Sistema (4.7)-(4.9) para a solução de (5.16)-(5.17).

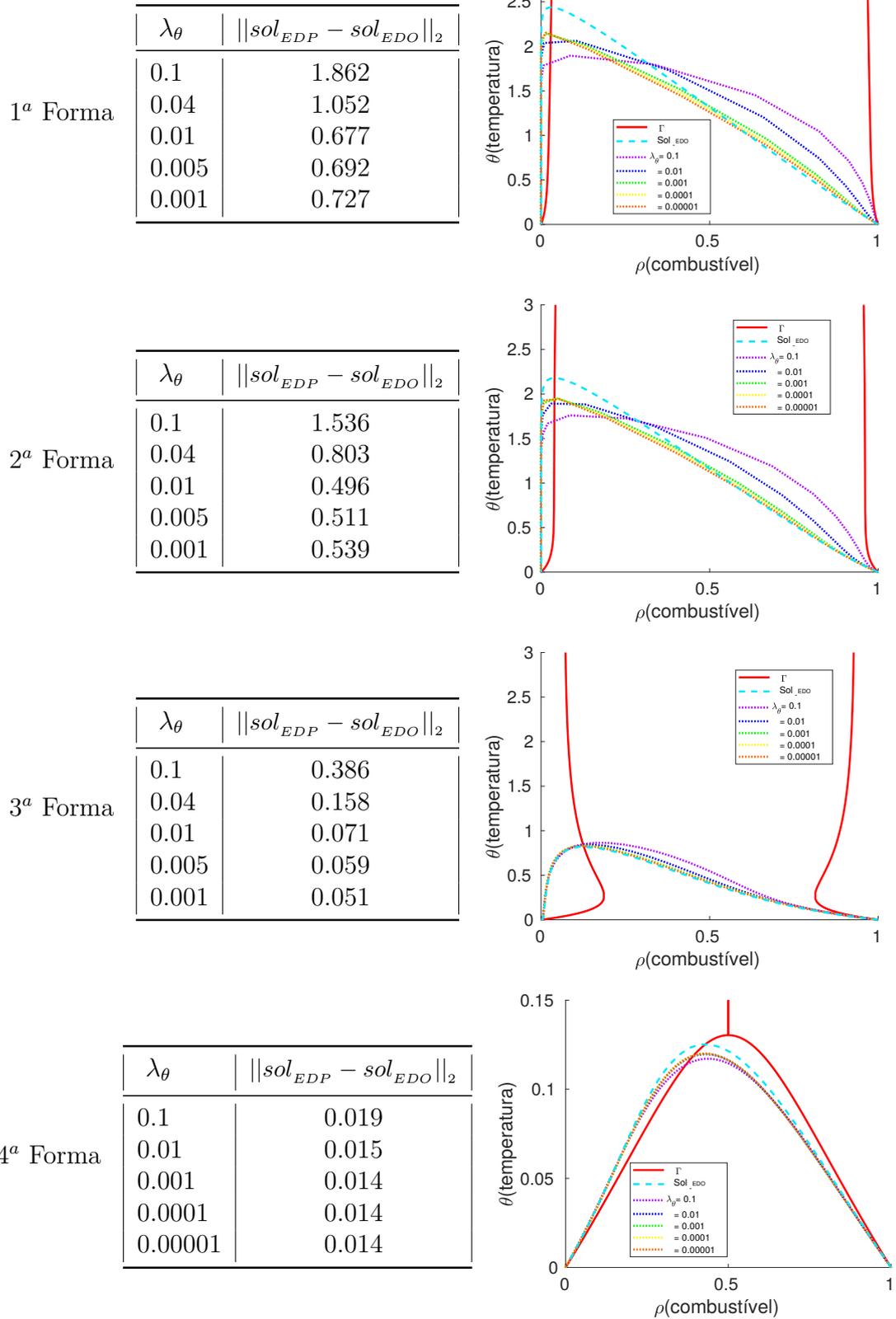


Figura 24 – Combustão rápida ($v > v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão conforme varia λ_θ .

6.2.1.3 Onda de combustão de ressonância

Ainda considerando os valores dos parâmetros dados na Observação 6.1 para ondas de combustão de ressonância, na Figura 25 apresentamos a solução do sistema sem difusão e a solução do sistema com difusão para $\lambda_\theta = 0.1$ e observamos que neste caso, para a 1ª e 2ª forma de Γ , a temperatura toma valores significativamente baixos comparados com os esperados pela teoria por causa da difusão numérica.

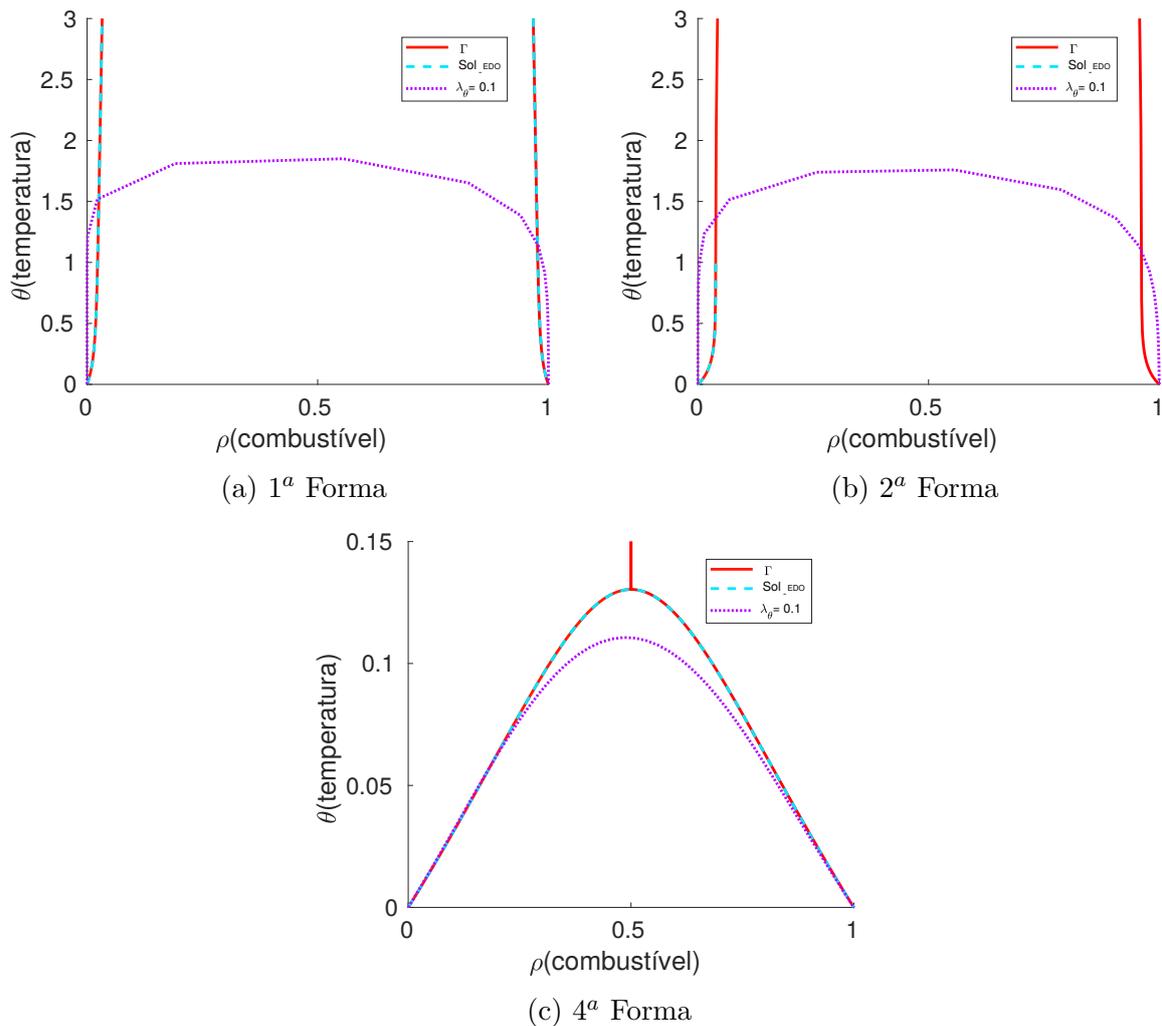
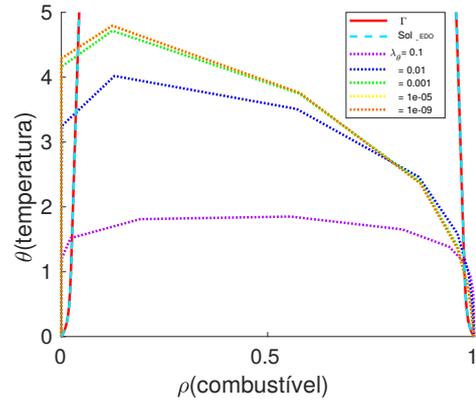


Figura 25 – Combustão de ressonância ($v = v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão.

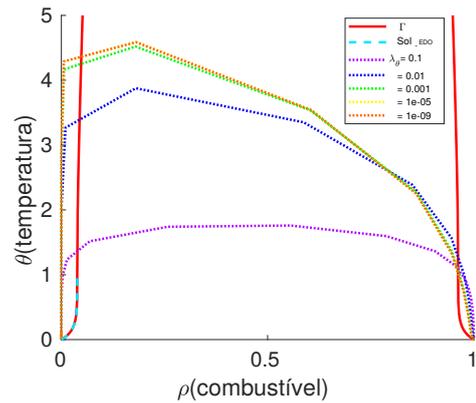
Novamente partindo dos valores usados para as simulações na Figura 23, variamos a difusão térmica. Apresentamos estes resultados na Figura 26 para estudar a comportamento das soluções do sistema com difusão, com respeito à solução do sistema sem difusão, conforme a difusão térmica diminui. Como para o caso de ressonância a solução do sistema sem difusão, em teoria, deveria coincidir com a curva Γ , então usamos Γ como solução do sistema sem difusão para estudar o comportamento das soluções do sistema com difusão.

Na Figura 26, observamos que para ondas de combustão de ressonância não apenas temos melhor estabilidade que no caso de combustão lenta, mas também a temperatura atinge valores ainda mais altos que no caso de combustão rápida. Dessa forma, atende melhor a teoria segundo λ_θ diminui. Porém, como existe difusão numérica, a solução do Sistema (4.7)-(4.9) não chega muito próximo da solução de (5.16)-(5.17).

	λ_θ	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
1ª Forma	0.1	143.862
	0.01	137.313
	0.001	136.088
	0.00001	136.016
	1e-09	136.016



	λ_θ	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
2ª Forma	0.1	139.963
	0.01	133.570
	0.001	132.365
	0.00001	132.284
	1e-09	132.276



	λ_θ	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
4ª Forma	0.1	0.046
	0.01	0.036
	0.001	0.034
	0.00001	0.034
	1e-09	0.034

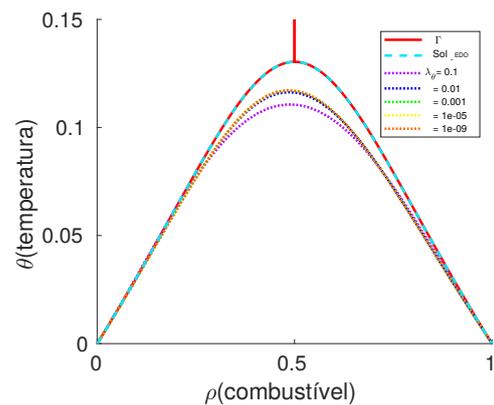


Figura 26 – Combustão ressonância ($v = v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão conforme varia λ_θ .

6.2.2 Refinamento da partição

Sabemos que para métodos numéricos de diferenças finitas dependendo do tamanho de passo pode-se gerar oscilações nas soluções [39]. Então em nossa busca de obter alguma informação sobre a influência que tem a solução do sistema sem difusão nas soluções dos sistemas com difusão faremos um refinamento de malha em algumas simulações apresentadas na Subseção 6.2.1. Para isto, dessa subseção escolhemos as simulações para o sistema com difusão onde λ_θ , em geral, fornecem uma melhor aproximação.

A partição ($\Delta x = 1$, $\Delta t = 5$) usada na Subseção 6.2.1 no esquema de Crank-Nicolson é refinada para ($\Delta x = 0.5$, $\Delta t = 2.5$) e para ($\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.5$).

6.2.2.1 *Onda de combustão lenta*

Para refinar a partição ($\Delta x = 1$, $\Delta t = 5$) neste caso, utilizamos os mesmos parâmetros usados na Figura 27. O resultado das simulações, onde a partição é refinada, é mostrado na Figura 28, observando que conforme Δx e Δt diminuem a solução do sistema com difusão torna-se mais estável. Assim, mostramos que a oscilação é efeito numérico e que a solução do Sistema (4.7)-(4.9) converge para a solução de (5.16)-(5.17).

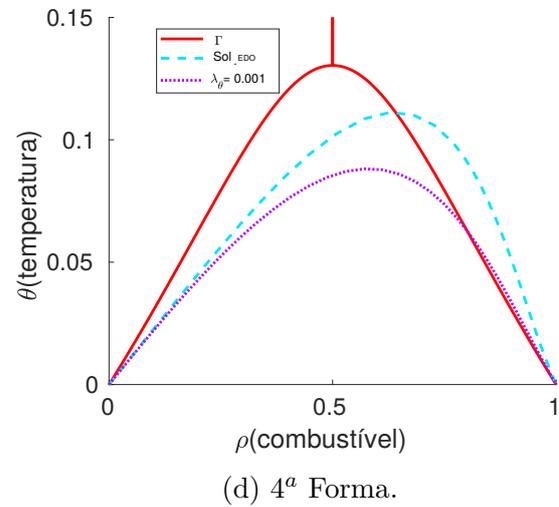
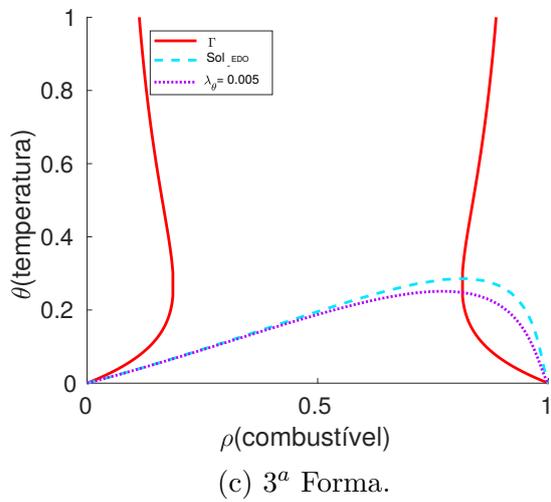
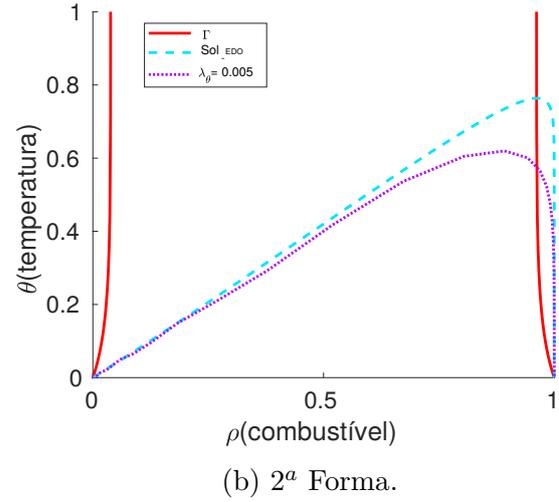
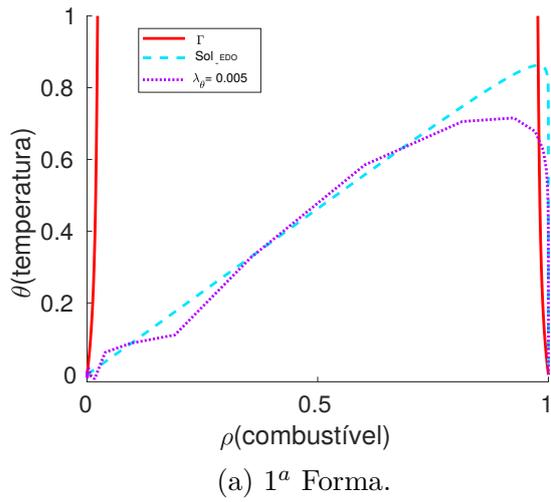
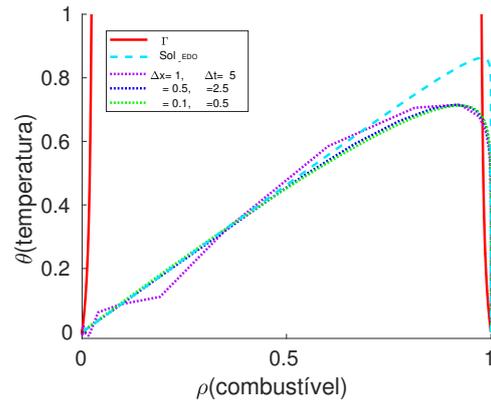
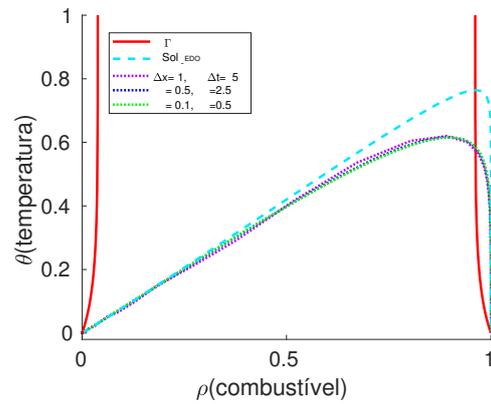


Figura 27 – Onda de combustão lenta ($v < v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão, para $\Delta x = 1$, $\Delta t = 5$.

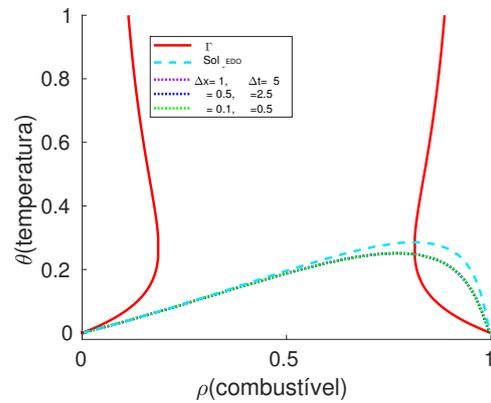
	Δx	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
1ª Forma	1	0.708
	0.5	0.680
	0.1	0.712



	Δx	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
2ª Forma	1	0.811
	0.5	0.832
	0.1	0.841



	Δx	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
3ª Forma	1	0.339
	0.5	0.338
	0.1	0.338



	Δx	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
4ª Forma	1	0.234
	0.5	0.232
	0.1	0.231

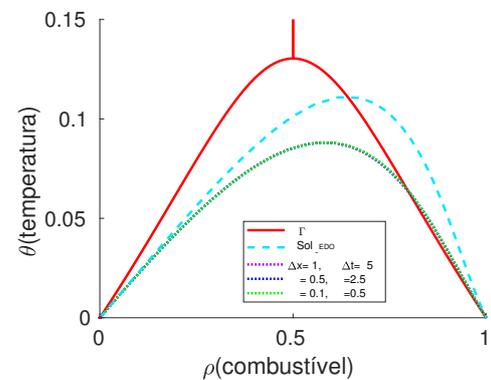


Figura 28 – Onda de combustão lenta ($v < v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do Sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão térmica conforme a partição é refinada.

6.2.2.2 Onda de combustão rápida

Para refinar a partição no caso de combustão rápida, usamos os mesmos parâmetros que na Figura 29. O resultado destas simulações é apresentado na Figura 30 observando que conforme Δx diminui melhora a proximidade entre as soluções do sistema com difusão e do sistema sem difusão.

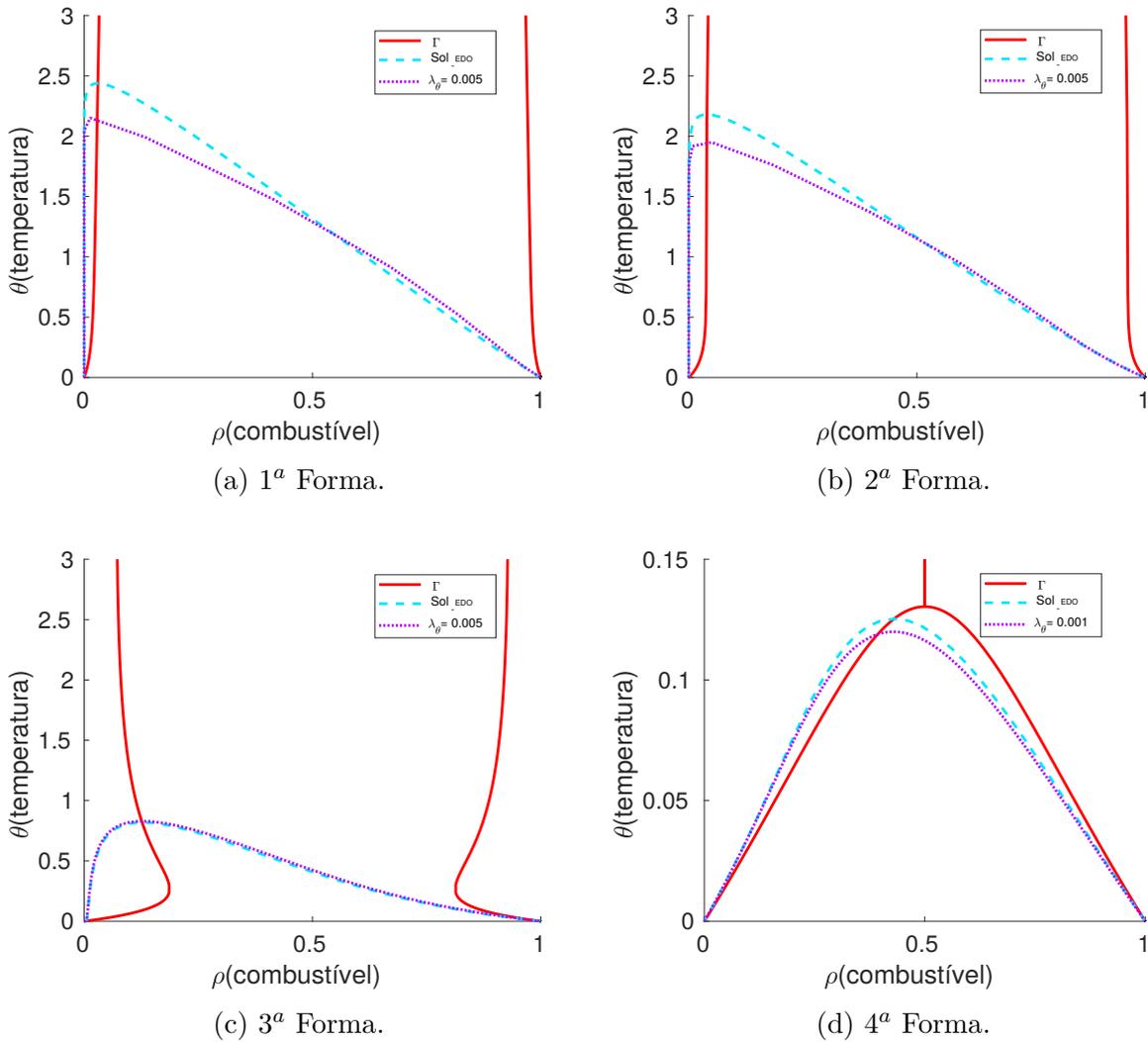


Figura 29 – Combustão rápida ($v > v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão, para $\Delta x = 1$, $\Delta t = 5$.

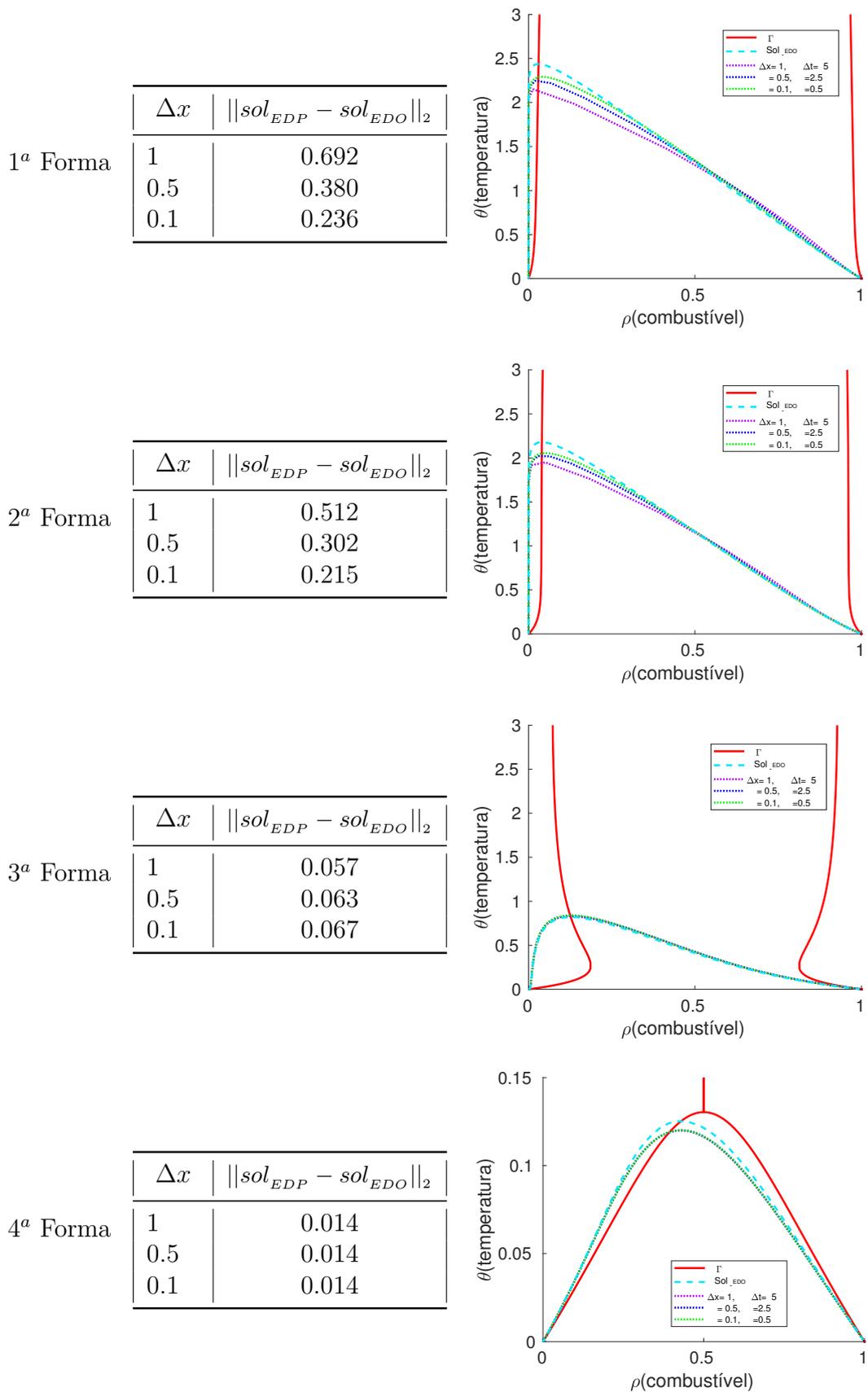


Figura 30 – Onda de combustão rápida ($v > v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do Sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão térmica conforme a partição é refinada.

6.2.2.3 Onda de combustão de ressonância

Para refinar a partição no caso de combustão ressonância, usamos os mesmos parâmetros que na Figura 31. O resultado destas simulações é apresentado na Figura 32 observando que conforme Δx diminui a temperatura segue crescendo em comparação com os casos de combustão lenta e rápida, e ainda comparado com este mesmo caso quando λ_θ e Δx eram mais grandes. Daí, que a difusão numérica é importante.

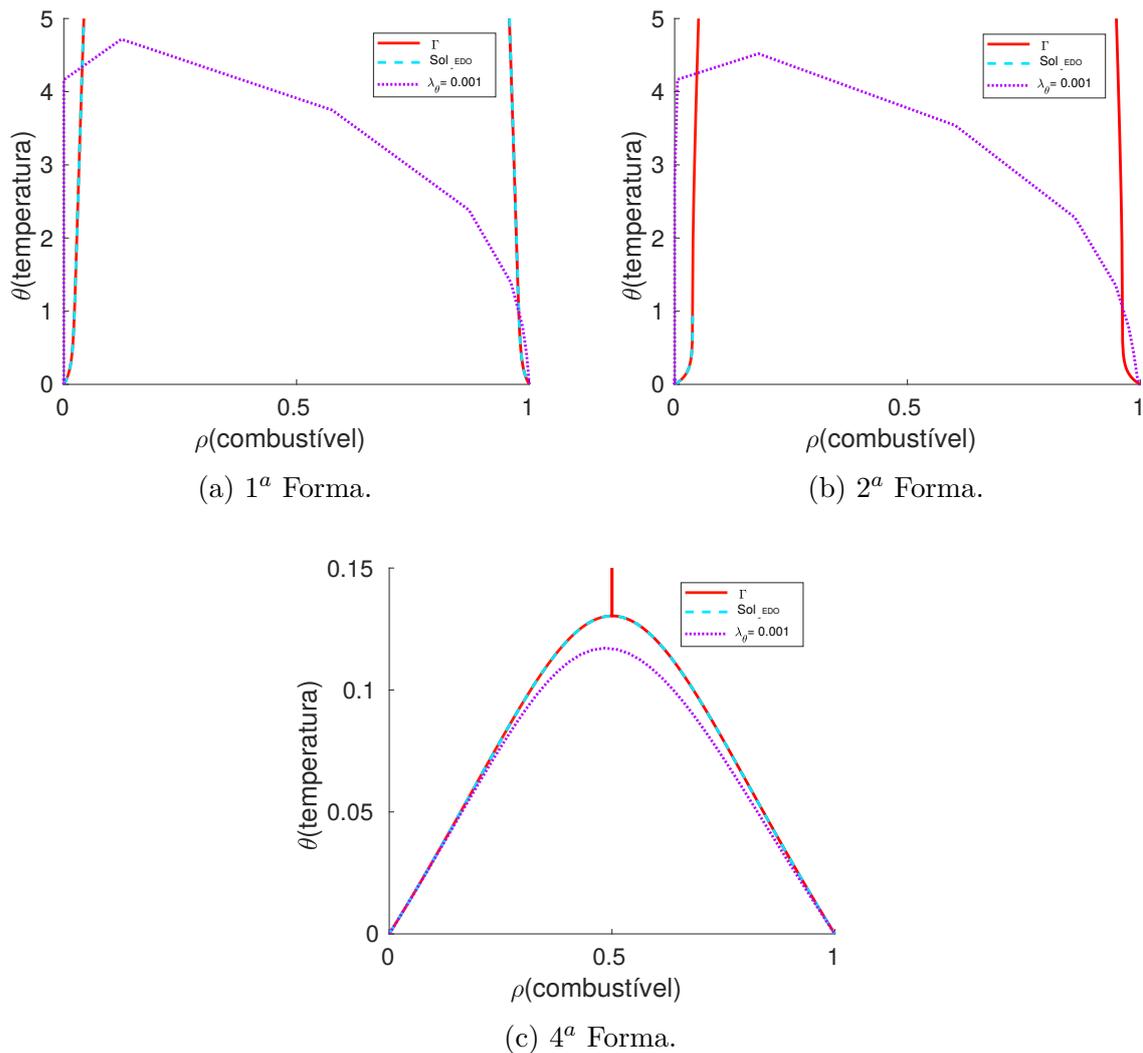
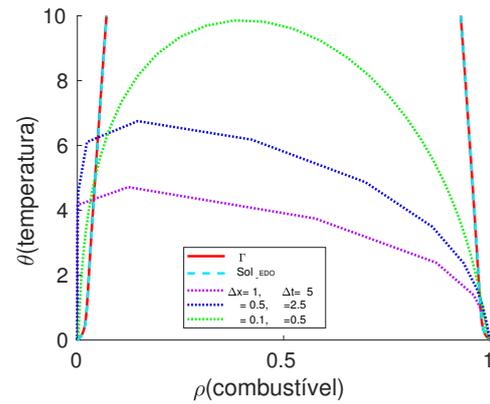
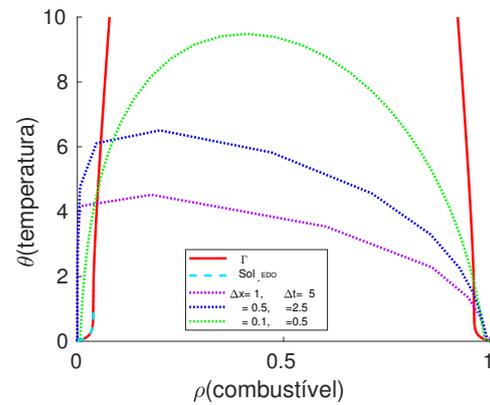


Figura 31 – Combustão de ressonância ($v = v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com a solução do sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão, para $\Delta x = 1$, $\Delta t = 5$.

	Δx	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
1ª Forma	1	136.088
	0.5	129.063
	0.1	116.385



	Δx	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
2ª Forma	1	132.360
	0.5	125.609
	0.1	113.678



	Δx	$\ sol_{EDP} - sol_{EDO}\ _2$
4ª Forma	1	0.034
	0.5	0.034
	0.1	0.034

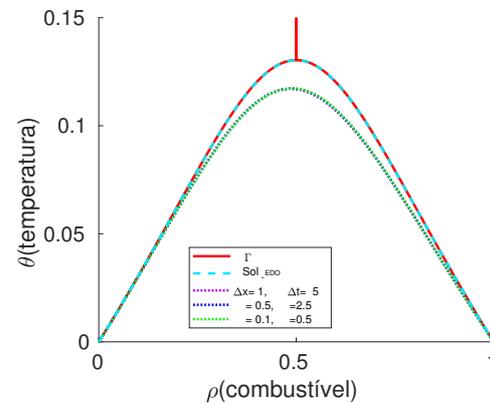


Figura 32 – Onda de combustão ressonância ($v = v_\theta$): Comparação da solução do sistema de EDOs (4.12)-(4.14) sem difusão com cada solução do Sistema de EDPs (4.7)-(4.9) com difusão térmica conforme a partição é refinada.

6.3 APLICAÇÃO DA TEORIA

Nesta seção apresentaremos um exemplo numérico usando os parâmetros dimensionais apresentados na Tabela 1, aplicando a teoria desenvolvida no Capítulo 5.

Sabemos do Teorema 5.3 que a onda de combustão pode ser lenta, rápida ou de ressonância. Substituindo os parâmetros adimensionais pelos dimensionais e usando

operações algébricas, obtemos

$$\begin{aligned}
v = \frac{v_Y}{\mu_Y + 1} &\leq v_\theta, \\
\frac{u}{\varphi v^* \frac{1}{\frac{k_p \rho^{res} t^*}{\varphi \rho_g} + 1}} &\leq \frac{c_g \rho_g u}{v^* C_m}, \\
\frac{1}{\varphi \frac{k_p \rho^{res}}{\varphi \rho_g} \frac{1}{k_p Y_{inj}} + 1} &\leq \frac{c_g \rho_g}{C_m}, \\
\frac{1}{\varphi \rho^{res} + \varphi \rho_g Y_{inj}} &\leq \frac{c_g \rho_g}{C_m}, \\
\frac{Y_{inj}}{\rho^{res} + \varphi \rho_g Y_{inj}} &\leq \frac{c_g}{C_m}, \\
\frac{Y_{inj} C_m}{c_g} &\leq \rho^{res} + \varphi \rho_g Y_{inj}, \\
\frac{Y_{inj} C_m}{c_g} - \varphi \rho_g Y_{inj} &\leq \rho^{res}, \\
Y_{inj} C_m - c_g \varphi \rho_g Y_{inj} &\leq c_g \rho^{res}, \\
Y_{inj} &\leq \frac{c_g \rho^{res}}{C_m - c_g \varphi \rho_g}.
\end{aligned}$$

Portanto,

1) Se

$$Y_{inj} < \frac{c_g \rho^{res}}{C_m - c_g \varphi \rho_g}, \quad (6.1)$$

existe uma onda de combustão lenta.

2) Se

$$Y_{inj} > \frac{c_g \rho^{res}}{C_m - c_g \varphi \rho_g}, \quad (6.2)$$

existe uma onda de combustão rápida.

3) Se

$$Y_{inj} = \frac{c_g \rho^{res}}{C_m - c_g \varphi \rho_g}, \quad (6.3)$$

existe uma onda de combustão de ressonância.

Da Subseção 5.2.1 segue que a curva Γ pode ter uma das 4 formas para cada tipo de onda de combustão. Existem dois critérios importantes que determinam a forma de Γ : (i) A relação de ε com θ_0 ; e (ii) A relação do valor de f nos pontos críticos com $1/4$.

Considerando o Capítulo 4 a relação $\varepsilon \leq 4\theta_0$ pode ser reescrita como $E_r/(R \Delta T^*) \leq T_{res}/\Delta T^*$, assim $E_r \leq T_{res} R$. Com isto, dado que os valores de E_r e $T_{res} R$ têm sentido físico quando são próximos a $58\,000$ [Joule/mole] e $6\,500$ [Joule/mole] respectivamente, então $E_r > T_{res} R$. Da Subseção 5.2.1 obtemos que a curva pode ser representada na 1ª, 3ª ou 4ª forma, porém não na 2ª forma da curva Γ .

Como $f(\theta_+^c) < f(\theta_-^c)$: se $f(\theta_+^c) > 1/4$, temos a 1ª forma da curva Γ ; se $f(\theta_-^c) < 1/4$, obtemos a 3ª forma da curva Γ ; e se $f(\theta_+^c) \leq 1/4 \leq f(\theta_-^c)$ temos a 4ª forma da curva Γ . Usando os resultados do Capítulo 4 os pontos críticos de f são dados por

$$\begin{aligned}\theta_{\pm}^c &= (0.5) \left(\varepsilon - 2\theta_0 \pm \sqrt{(\varepsilon^2 - 4\varepsilon\theta_0)} \right), \\ \theta_{\pm}^c &= (0.5) \left(\frac{E_r}{R\Delta T^*} - 2\frac{T_{res}}{\Delta T^*} \pm \sqrt{\left(\frac{E_r}{R\Delta T^*}\right)^2 - 4\left(\frac{E_r}{R\Delta T^*}\right)\left(\frac{T_{res}}{\Delta T^*}\right)} \right), \\ \theta_{\pm}^c &= (0.5) \left(\frac{E_r}{R\Delta T^*} - 2\frac{RT_{res}}{R\Delta T^*} \pm \sqrt{\left(\frac{E_r}{R\Delta T^*}\right)^2 - 4\left(\frac{E_r}{R\Delta T^*}\right)\left(\frac{RT_{res}}{R\Delta T^*}\right)} \right), \\ \theta_{\pm}^c &= (0.5)\left(\frac{1}{R\Delta T^*}\right) \left(E_r - 2RT_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4(E_r)(RT_{res})} \right), \\ \theta_{\pm}^c &= (0.5)\left(\frac{C_m}{RQ_r\rho^{res}}\right) \left(E_r - 2RT_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_rRT_{res}} \right).\end{aligned}$$

Continuando, precisamos de $\varepsilon/(\theta_{\pm}^c + \theta_0)$ em parâmetros dimensionais

$$\begin{aligned}\frac{\varepsilon}{\theta_{\pm}^c + \theta_0} &= \left(\frac{E_r}{R\Delta T^*}\right) \left(\frac{1}{\theta_{\pm}^c + \frac{T_{res}}{\Delta T^*}}\right), \\ \frac{\varepsilon}{\theta_{\pm}^c + \theta_0} &= \frac{E_r}{R(\Delta T^*\theta_{\pm}^c + T_{res})}, \\ \frac{\varepsilon}{\theta_{\pm}^c + \theta_0} &= \frac{E_r}{R\left(\frac{Q_r\rho^{res}}{C_m}\theta_{\pm}^c + T_{res}\right)}, \\ \frac{\varepsilon}{\theta_{\pm}^c + \theta_0} &= \frac{C_mE_r}{R(Q_r\rho^{res}\theta_{\pm}^c + C_mT_{res})}, \\ \frac{\varepsilon}{\theta_{\pm}^c + \theta_0} &= \frac{C_mE_r}{R\left(Q_r\rho^{res}(0.5)\left(\frac{C_m}{RQ_r\rho^{res}}\right)\left(E_r - 2RT_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_rRT_{res}}\right) + C_mT_{res}\right)}, \\ \frac{\varepsilon}{\theta_{\pm}^c + \theta_0} &= \frac{C_mE_r}{R\left(\frac{C_m}{2R}\left(E_r - 2RT_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_rRT_{res}}\right) + C_mT_{res}\right)}, \\ \frac{\varepsilon}{\theta_{\pm}^c + \theta_0} &= \frac{2E_r}{\left(E_r - 2RT_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_rRT_{res}}\right) + 2RT_{res}}, \\ \frac{\varepsilon}{\theta_{\pm}^c + \theta_0} &= \frac{2E_r}{E_r \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_rRT_{res}}}.\end{aligned}$$

Disso,

$$\begin{aligned}f(\theta_{\pm}^c) &= \beta\theta^c \exp\left(\frac{\varepsilon}{\theta^c + \theta_0}\right), \\ f(\theta_{\pm}^c) &= \left(\frac{\alpha}{C_m}\right) \left(\frac{1}{k_p Y_{inj}}\right) (0.5) \left(\frac{C_m}{RQ_r\rho^{res}}\right) \left(E_r - 2RT_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_rRT_{res}}\right) \\ &\quad \exp\left(\frac{\varepsilon}{\theta^c + \theta_0}\right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f(\theta_{\pm}^c) &= \left(\frac{0.5 \alpha}{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}} \right) \left(E_r - 2RT_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right) \exp \left(\frac{\varepsilon}{\theta^c + \theta_0} \right), \\
f(\theta_{\pm}^c) &= \left(\frac{0.5 \alpha \left(E_r - 2RT_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)}{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}} \right) \exp \left(\frac{\varepsilon}{\theta^c + \theta_0} \right), \\
f(\theta_{\pm}^c) &= \frac{\alpha \left(E_r - 2RT_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)}{2k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}} \exp \left(\frac{2E_r}{E_r \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right).
\end{aligned}$$

Portanto, as possíveis formas de Γ para valores físicos podem-se obter em função de α

1ª Forma ($f(\theta_+^c) > 1/4$):

$$\begin{aligned}
&\frac{\alpha \left(E_r - 2RT_{res} + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)}{2k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}} \exp \left(\frac{2E_r}{E_r + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right) > \frac{1}{4}, \\
&\frac{2\alpha \left(E_r - 2RT_{res} + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)}{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}} \exp \left(\frac{2E_r}{E_r + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right) > 1, \\
\alpha &> \frac{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}}{2 \left(E_r - 2RT_{res} + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)} \exp \left(\frac{-2E_r}{E_r + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right).
\end{aligned}$$

3ª Forma ($f(\theta_-^c) < 1/4$):

$$\begin{aligned}
&\frac{\alpha \left(E_r - 2RT_{res} - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)}{2k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}} \exp \left(\frac{2E_r}{E_r - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right) < \frac{1}{4}, \\
&\frac{2\alpha \left(E_r - 2RT_{res} - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)}{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}} \exp \left(\frac{2E_r}{E_r - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right) < 1, \\
\alpha &< \frac{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}}{2 \left(E_r - 2RT_{res} - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)} \exp \left(\frac{-2E_r}{E_r - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right).
\end{aligned}$$

4ª Forma ($f(\theta_+^c) \leq 1/4 \leq f(\theta_-^c)$):

$$\begin{aligned}
\alpha &< \frac{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}}{2 \left(E_r - 2RT_{res} + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)} \exp \left(\frac{-2E_r}{E_r + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right), \\
\alpha &> \frac{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}}{2 \left(E_r - 2RT_{res} - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)} \exp \left(\frac{-2E_r}{E_r - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right).
\end{aligned}$$

Agora, denotando

$$\alpha_+ = \frac{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}}{2 \left(E_r - 2R T_{res} + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)} \exp \left(\frac{-2E_r}{E_r + \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right),$$

$$\alpha_- = \frac{k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}}{2 \left(E_r - 2R T_{res} - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)} \exp \left(\frac{-2E_r}{E_r - \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right).$$

Usando os valores dimensionais da Tabela 1, obtemos

$$\frac{c_g \rho^{res}}{C_m - c_g \varphi \rho_g} = \frac{(27.42)(372)}{(2 \cdot 10^6) - (27.42)(0.3)(45)} = \frac{1.02 \cdot 10^4}{2 \cdot 10^6 - 370.17} = \frac{1.02 \cdot 10^4}{1.9996 \cdot 10^6} = 0.0051,$$

logo, a Equação (6.2) é válida e existe uma onda de combustão rápida.

Para obter a forma que determinam os parâmetros da Tabela 1, avaluamos

$$f(\theta_{\pm}^c) = \frac{\alpha \left(E_r - 2R T_{res} \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}} \right)}{2k_p Y_{inj} R Q_r \rho^{res}} \exp \left(\frac{2E_r}{E_r \pm \sqrt{(E_r)^2 - 4E_r R T_{res}}} \right)$$

no ponto crítico θ_+

$$f(\theta_+^c) = \frac{(0.2) \left(58000 - 2(8.314)(273) + \sqrt{(58000)^2 - 4(58000)(8.314)(273)} \right)}{2(500)(1)(8.314)(4 \cdot 10^5)(372)} \exp \left(\frac{2(58000)}{(58000) + \sqrt{(58000)^2 - 4(58000)(8.314)(273)}} \right),$$

$$f(\theta_+^c) = \frac{(0.2) \left(5.3461 \cdot 10^4 + \sqrt{2.8374 \cdot 10^9} \right)}{1.2371 \cdot 10^{12}} \exp \left(\frac{2(58000)}{(58000) + \sqrt{2.8374 \cdot 10^9}} \right),$$

$$f(\theta_+^c) = \frac{(0.2) (1.0673 \cdot 10^5)}{1.2371 \cdot 10^{12}} \exp \left(\frac{2(58000)}{1.1127 \cdot 10^5} \right),$$

$$f(\theta_+^c) = \frac{2.1346 \cdot 10^4}{1.2371 \cdot 10^{12}} \exp(1.0425),$$

$$f(\theta_+^c) = 4.8940 \cdot 10^{-8}.$$

e no ponto crítico θ_-

$$f(\theta_-^c) = \frac{(0.2) \left(58000 - 2(8.314)(273) - \sqrt{(58000)^2 - 4(58000)(8.314)(273)} \right)}{2(500)(1)(8.314)(4 \cdot 10^5)(372)} \exp \left(\frac{2(58000)}{(58000) - \sqrt{(58000)^2 - 4(58000)(8.314)(273)}} \right),$$

$$f(\theta_-^c) = \frac{(0.2) \left(5.3461 \cdot 10^4 - \sqrt{2.8374 \cdot 10^9} \right)}{1.2371 \cdot 10^{12}} \exp \left(\frac{2(58000)}{(58000) - \sqrt{2.8374 \cdot 10^9}} \right),$$

$$f(\theta_-^c) = \frac{(0.2) (193.0753)}{1.2371 \cdot 10^{12}} \exp \left(\frac{2(58000)}{4.7325e + 03} \right),$$

$$f(\theta_-^c) = \frac{38.6151}{1.2371 \cdot 10^{12}} \exp(24.5113),$$

$$f(\theta_-^c) = 1.3786.$$

Portanto, a curva Γ é representada na 4ª forma.

Na Figura 33, usando as contas acima e o esquema de Cranck-Nicolson representamos a solução do Sistema (4.7)-(4.9) no retrato de fase (ρ, θ) para os valores dos parâmetros da Tabela 1 e se obtém uma temperatura máxima $\theta = 1.8$ que usando a Equação (4.5) em parâmetros dimensionais é $T = (1.8)(74.4 K) + 273 K = 406,92 K$. Assim, para parâmetros reais encontrados na literatura o modelo apresenta temperaturas compatíveis com as temperaturas de combustão no regime HTO (hight temperature oxydation).

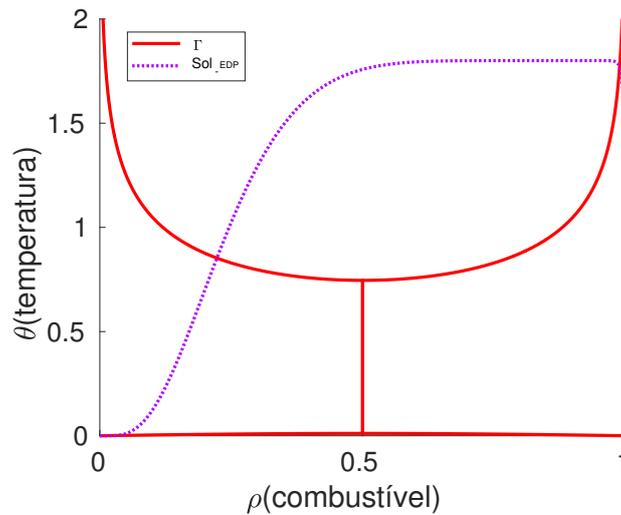


Figura 33 – Solução do Sistema (4.7)-(4.9) no retrato de fase (ρ, θ) usando os valores dos parâmetros da Tabela 1.

7 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho provamos a existência e unicidade das soluções de problemas de Riemann para o Sistema (4.12)-(4.14), que modela combustão in-situ em um meio poroso que contém combustível sólido levando em conta as perdas térmicas para rocha circundante além de outras considerações descritas no Capítulo 4. Mostramos que as sequências que descrevem essas soluções estão formadas por uma única onda viajante de combustão do tipo: lenta, rápida e de ressonância. A existência dessas ondas foi provada por análise de retrato de fase com ajuda de alguns conceitos e resultados relativos ao Teorema da Variedade Estável, à teoria de ondas viajantes e de leis de conservação.

Também apresentamos simulações numéricas que validam a existência das ondas viajantes de combustão utilizando o método de Runge-Kutta, observando algumas particularidades no caso de ressonância. Ainda, obtivemos soluções numéricas para um sistema mais geral (4.7)-(4.9) no qual se acrescenta a difusão térmica e a do gás mediante o esquema de diferenças finitas de Crank-Nicolson. As soluções obtidas para ambos sistemas foram comparadas e provou-se numericamente que as soluções do sistema com difusão aproximam-se da solução do sistema sem difusão conforme a difusão térmica diminui e conforme refinamos a partição. As soluções numéricas para ambos sistemas são comparadas.

Por fim um exemplo numérico com valores típicos dos parâmetros para um modelo de combustão foi apresentado e observamos que para parâmetros reais encontrados na literatura o modelo apresenta temperaturas compatíveis com as temperaturas de combustão no regime HTO (hight temperature oxydation).

Assim, para futuros trabalhos, faz sentido provar a existência de solução para o modelo mais geral apresentado neste trabalho modelado pelo Sistema (4.7)-(4.9) utilizando a Teoria Geométrica de Perturbação Singular.

REFERÊNCIAS

- [1] AKKUTLU, I.Y.; YORTSOS, Y.C. The dynamics of in-situ combustion fronts in porous media. *Combustion and Flame*, 134(3):229–247, 2003.
- [2] ALDUSHIN, A.P.; RUMANOV, I.E.; MATKOWSKY, B.J. Maximal energy accumulation in a superadiabatic filtration combustion wave. *Combustion and Flame*, 118(1-2):76–90, 1999.
- [3] ANTUNA, P.J. Singular traveling waves in systems of balance laws. Master’s thesis, IMPA, 2016.
- [4] BILLINGHAM, J. Phase plane analysis of one-dimensional reaction diffusion waves with degenerate reaction terms. *Dynamics and Stability of Systems*, 15(1):23–33, 2000.
- [5] CHAPIRO, G.; MARCHESIN, D. The effect of thermal losses on traveling waves for in-situ combustion in porous medium. In *Journal of Physics: Conference Series*, 633, <https://doi.org/10.1088/1742-6596/633/1/012098>, 2015.
- [6] CHAPIRO, G.; MARCHESIN, D.; SCHECTER, S. Combustion waves and riemann solutions in light porous foam. *Journal of Hyperbolic Differential Equations*, 11(02):295–328, 2014.
- [7] CHAPIRO, G. *Gas-solid combustion in insulated porous media*. PhD thesis, IMPA, 2009.
- [8] CHAPIRO, G.; DE SOUZA, A.J. Asymptotic approximation for counterflow combustion in porous media. *Applicable Analysis*, 95(1):63–77, 2016.
- [9] CHAPIRO, G.; FURTADO, L.; MARCHESIN, D.; SCHECTER, S. Stability of interacting traveling waves in reaction-convection-diffusion systems. DCDS Issue special, 258–266. <https://aimsciences.org/journals/displayPaperPro.jsp?paperID=118853>, 2015.
- [10] CHAPIRO, G.; MAILYBAEV, A.A.; DE SOUZA, A.J.; MARCHESIN, D.; BRUINING, J. Asymptotic approximation of long-time solution for low-temperature filtration combustion. *Computational geosciences*, 16(3):799–808, 2012.
- [11] CHAPIRO, G.; SENOS, L. Riemann solutions for counterflow combustion in light porous foam. *Computational and Applied Mathematics*, 37(2):1721–1736, 2018.
- [12] LAW, C.K. *Combustion physics*, 2006.
- [13] DE SOUZA, A.J.; AKKUTLU, I.Y.; MARCHESIN, D. Wave sequences for solid fuel adiabatic in-situ combustion in porous media. *Computational & Applied Mathematics*, 25(1):27–54, 2006.
- [14] EVANS, L.C. *Partial differential equations* (providence, ri: American mathematical society). 1998.
- [15] FICKET, W.; DAVIS, W.C. *Detonation: theory and experiment*, 1979.

- [16] GHAZARYAN, A. Nonlinear stability of high lewis number combustion fronts. *Indiana University Mathematics Journal*, 181–212, 2009.
- [17] GHAZARYAN, A.; LATUSHKIN, Y.; SCHECTER, S.; DE SOUZA, A. J.; Stability of gasless combustion fronts in one-dimensional solids. *Archive for rational mechanics and analysis*, 198(3):981–1030, 2010.
- [18] GHAZARYAN, A.; SCHECTER, S.; SIMON, P.L. Gasless combustion fronts with heat loss. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 73(3):1303–1326, 2013.
- [19] GILDING, B.H.; KERSNER, R. *Travelling waves in nonlinear diffusion-convection reaction*, volume 60. Birkhäuser, 2012.
- [20] HARTERICH, J. Viscous profiles of traveling waves in scalar balance laws: the canard case. *Methods and Applications of Analysis*, 10(1):097–118, 2003.
- [21] HARTERICH, J.; LIEBSCHER, S. Travelling waves in systems of hyperbolic balance laws. In *Analysis and Numerics for Conservation Laws*, 281–300. Springer, 2005.
- [22] HOMBURG, A.J.; SANDSTEDTE, B. Homoclinic and heteroclinic bifurcations in vector fields. *Handbook of dynamical systems*, 3:379–524, 2010.
- [23] JONES, C.K.R.T. Geometric singular perturbation theory. In *Dynamical systems*, 44–118. Springer, 1995.
- [24] KULIKOVSKII, A.G.; PASHCHENKO, N.T. Propagation regimes of self-supported light-detonation waves. *Fluid Dynamics*, 40(5):818–828, 2005.
- [25] LAKE, L.W. Enhanced oil recovery. *Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall*, 1989.
- [26] LAX, P.D. Hyperbolic systems of conservation laws ii. *Communications on pure and applied mathematics*, 10(4):537–566, 1957.
- [27] LEDOINO, I.S.; CONCEIÇÃO, D.T.Jr.; MARCHESIN, D. Relatório técnico: Simulador para problemas de oxidação em reservatórios. -UFRRJ, 2014.
- [28] LU, Z. A diffusion-flame analog of forward smolder waves:(i) 1-d steady structures. *Combustion and Flame*, 196:515–528, 2018.
- [29] LU, Z.; DONG, Y. Fingering instability in forward smolder combustion. *Combustion Theory and Modelling*, 15(6):795–815, 2011.
- [30] MAILYBAEV, A.A.; MARCHESIN, D.; BRUINING, J. Resonance in low-temperature oxidation waves for porous media. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 43(5):2230–2252, 2011.
- [31] PEREIRA, W. D. S. Validação numérica de estimativas analíticas aplicadas à combustão em meios porosos. Master’s thesis, UFJF, 2015.
- [32] PERKO, L. *Differential equations and dynamical systems*, volume 7. Springer Science & Business Media, 2013.
- [33] PRATS, M. Thermal recovery. *SPE of AIME, New York, NY*, 1982.

- [34] RANDALL, J.L. Numerical methods for conservation laws. *Lectures in Mathematics ETH Zürich*, 1992.
- [35] SCHULT, D.A.; BAYLISS, A.; MATKOWSKY, B.J. Traveling waves in natural counterflow filtration combustion and their stability. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 58(3):806–852, 1998.
- [36] SCHULT, D.A.; MATKOWSKY, B.J.; VOLPERT, V.A.; FERNANDEZ-PELLO, A.C. Forced forward smolder combustion. *Combustion and Flame*, 104(1-2):1–26, 1996.
- [37] SMOLLER, J. Shock waves and reaction—diffusion equations. 1994.
- [38] SOTOMAYOR, J. *Lições de equações diferenciais ordinárias*, volume 11. Instituto de Matemática Pura e Aplicada, CNPq, 1979.
- [39] STRIKWERDA, J.C. *Finite difference schemes and partial differential equations*, volume 88. Siam, 2004.
- [40] VAN DUIJN, C.J. An introduction to conservation laws: theory and applications to multi-phase flow. *Eindhoven University of Technology, The Netherlands*, 2003.
- [41] VARAS, F.; VEGA, José M. Linear stability of a plane front in solid combustion at large heat of reaction. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 62(5):1810–1822, 2002.
- [42] VOLPERT, Aizik I.; VOLPERT, Vitaly A; VOLPERT, Vladimir A. *Traveling wave solutions of parabolic systems*, volume 140. American Mathematical Soc., 1994.