

PGMEC

PROGRAMA FRANCISCO EDUARDO MOURÃO SABOYA DE
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
ESCOLA DE ENGENHARIA
UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

Tese de Doutorado

UM NOVO APROXIMANTE DE RIEMANN
PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS
COM ONDAS DE CHOQUE

ELIANE MARACAJÁ PORTO

JULHO DE 2009

ELIANE MARACAJÁ PORTO

UM NOVO APROXIMANTE DE RIEMANN PARA
SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS COM ONDAS DE
CHOQUE

Tese de Doutorado apresentada ao Programa
Francisco Eduardo Mourão Saboya de Pós-
Graduação em Engenharia Mecânica da UFF
como parte dos requisitos para a obtenção do
título de Doutor em Ciências em Engenharia
Mecânica

Orientadores: Maria Laura Martins Costa (PGMEC/UFF)
Rogério Martins Saldanha da Gama (UERJ)

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
Niterói, 21 de Julho de 2009

Agradecimentos

À professora Maria Laura Martins Costa, pelo incentivo e dedicação constantes durante sua orientação, desde o início desta empreitada, fazendo com que este trabalho fosse possível. Ao professor Rogério Martins Saldanha da Gama pela paciência e carinho durante a sua preciosa co-orientação, sempre se colocando à disposição para superar as minhas dificuldades. A todos os professores da Coordenação de Pós-Graduação pelos imprescindíveis conhecimentos transmitidos.

Ao Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC/MCT, e em especial aos professores Marco Antônio Raupp e Pedro Leite da Silva Dias, seus diretores, pela oportunidade, concedendo-me a liberação parcial de minhas atividades na instituição durante o doutorado.

À minha família pelo incentivo e a todos aqueles, que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

SUMÁRIO

Lista de Figuras	i
Lista de Tabelas	iv
Lista de Símbolos	iv
Resumo	vi
Abstract	vii

Capítulo 1. Introdução

1.1. Considerações Gerais	1
1.2. Revisão Bibliográfica	7
1.3. Descrição do Trabalho	10

Capítulo 2. Descrição Matemática do Problema

2.1. Introdução	13
2.2. Descrição Euleriana e Descrição Lagrangeana do Movimento	18
2.2.1. Derivada Material Seguindo a Partícula da Espécie A	19
2.3. Teorema do Transporte de Reynolds	22
2.4. Teorema do Transporte de Reynolds para uma Região com Interface de Fases	23
2.5. Conservação de Massa	24
2.5.1. Conservação de Massa para uma Espécie	25
2.6. Balanço de Momentum Linear para uma Mistura	28
2.7. Balanço de Momentum Angular para uma Mistura	31
2.8. Modelo Mecânico da Dispersão de Poluentes na Atmosfera	32

Capítulo 3. Sistemas Hiperbólicos de Leis de Conservação

3.1. Introdução	36
3.2. Sistema Hiperbólico Linear de Leis de Conservação	37
3.3. Sistemas Não Lineares de Leis de Conservação	41
3.3.1. Solução Clássica e Características	41
3.3.2. Solução Fraca	43
3.3.3. Condições para Existência de Descontinuidade	44
3.3.4. Existência e Unicidade de Soluções Fracas	45
3.3.4.1. Condição de Entropia	46
3.3.4.2. Critério de Viscosidade	49

Capítulo 4. O Problema de Riemann

4.1. Introdução	51
4.2. O Problema de Riemann para Sistemas Lineares	52
4.3. O Problema de Riemann para Sistemas Não Lineares	55
4.3.1. Campos Característicos	56
4.4. Solução Generalizada do Problema de Riemann	60
4.5. O Problema de Riemann Associado	71
4.5.1. Solução do Problema de Riemann Associado	73
4.5.2. Análise do Salto na Conexão $*1 \rightarrow *2$	81
4.6. Soluções Generalizadas para o Problema Riemann Associado	85

Capítulo 5. Aproximante de Riemann

5.1. Descrição Física	90
5.2. Aproximação Numérica	91
5.2.1. Técnica de Partição do Operador	92
5.2.2. O Esquema de Glimm	93
5.3. Procedimento Alternativo – Aproximante de Riemann	96
5.4. O Aproximante de Riemann	98

Capítulo 6. Esquema de Glimm e Técnica de Partição do Operador

6.1. O Esquema de Glimm	102
6.1.1. Introdução	102
6.1.2. Aproximação Numérica	105
6.2. Técnica de Partição do Operador	109
6.2.1. Introdução	109
6.2.2. Aproximação Numérica	110

Capítulo 7. Resultados Numéricos

112

Capítulo 8. Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

151

Referências Bibliográficas

154

APÊNDICE: Métodos Numéricos para Leis de Conservação

160

Lista de Figuras

Figura 4.1 – Ilustração dos comportamentos: genuinamente não linear e linearmente degenerado	57
Figura 4.2 – Função degrau.....	61
Figura 6.1 – Ilustração de um passo genérico no esquema de Glimm.....	105
Figura 6.2 – Construção de uma distribuição constante por partes para uma função F	107
Figura 6.3 – Esquema de uma Casca Esférica	111
Figura 7.1 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume com a posição. – Dados iniciais: ρ e ω_1 constantes e função degrau para v	115
Figura 7.2 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume com a posição. – Dados iniciais: ρ e ω_1 constantes e velocidade constante na maior parte do domínio, exceto por uma pequena região com baixa velocidade.....	116
Figura 7.3 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes por unidade de volume com a posição radial. – Dados iniciais: funções degrau para ρ, ω_1, ω_2 e ω_3 e função linear decrescente para v	119
Figura 7.4 – Superfícies de densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume ($\rho\omega_1$), referentes à Figura 7.3 – (a), (c), (e): Solução exata do problema de Riemann; (b), (d), (f): Aproximante de Riemann.....	121
Figura 7.5 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes por unidade de volume com a posição radial. – Dados iniciais: funções degrau para ρ, ω_1 e ω_2 e funções lineares para ω_3 e para v	122
Figura 7.6 – Superfícies de densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume ($\rho\omega_1$), referentes à Figura 7.5 – (a), (c), (e): Solução exata do problema de Riemann; (b), (d), (f): Aproximante de Riemann.....	123
Figura 7.7 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes por unidade de volume com a posição radial. – Dados iniciais: funções degrau para ρ, ω_1 e ω_2 ; função linear para ω_3 e função linear e constante para v	124
Figura 7.8 – Superfícies de densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume ($\rho\omega_1$), referentes à Figura 7.7 – (a), (c), (e): Solução exata do problema de Riemann; (b), (d), (f): Aproximante de Riemann.....	125

Figura 7.9 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes por unidade de volume com a posição radial. – Dados iniciais: funções degrau para v , ω_1 , ω_2 e ω_3 e função linear para ρ	126
Figura 7.10 – Superfícies de densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume ($\rho\omega_1$), como função do tempo e da posição radial, referentes à Figura 7.9 – (a), (c), (e): Solução exata do problema de Riemann; (b), (d), (f): Aproximante de Riemann.....	127
Figura 7.11 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 0.05$ e $\alpha = 0.8$. Dados iniciais: Caso I.....	130
Figura 7.12 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 2.05$ e $\alpha = 0.8$. Dados iniciais: Caso I.....	131
Figura 7.13 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 0.05$ e $\alpha = 0.2$. Dados iniciais: Caso I.....	132
Figura 7.14 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 2.05$ e $\alpha = 0.2$. Dados iniciais: Caso I.....	132
Figura 7.15 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 0.05$ e $\alpha = 0.8$. Dados iniciais: Caso II.....	133
Figura 7.16 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 2.05$ e $\alpha = 0.8$. Dados iniciais: Caso II.....	134
Figura 7.17 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 0.05$ e $\alpha = 0.2$. Dados iniciais: Caso II.....	135
Figura 7.18 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 2.05$ e $\alpha = 0.2$. Dados iniciais: Caso II.....	135
Figura 7.19 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 0.05$ e $\alpha = 0.8$. Dados iniciais: Caso III.....	136
Figura 7.20 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 2.05$ e $\alpha = 0.8$. Dados iniciais: Caso III.....	137
Figura 7.21 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 0.05$ e $\alpha = 0.2$. Dados iniciais: Caso III.....	138

Figura 7.22 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 2.05$ e $\alpha = 0.2$. Dados iniciais: Caso III.....	138
Figura 7.23 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 0.05$ e $\alpha = 0.8$. Dados iniciais: Caso IV.....	140
Figura 7.24 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 2.05$ e $\alpha = 0.8$. Dados iniciais: Caso IV.....	140
Figura 7.25 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 0.05$ e $\alpha = 0.2$. Dados iniciais: Caso V.....	141
Figura 7.26 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição radial para $R_i = 2.05$ e $\alpha = 0.2$. Dados iniciais: Caso V.....	142
Figura 7.27 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição para o Caso I.....	145
Figura 7.28 – Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.27, considerando as variações de ρ, v e ω_i com a posição.....	145
Figura 7.29 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição para o Caso II.....	146
Figura 7.30 – Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.29, considerando as variações de ρ, v e ω_i com a posição.....	146
Figura 7.31 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição para o Caso III.....	147
Figura 7.32 – Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.31, considerando as variações de ρ, v e ω_i com a posição.....	147
Figura 7.33 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição para o Caso IV.....	148
Figura 7.34 – Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.33, considerando as variações de ρ, v e ω_i com a posição.....	148
Figura 7.35 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes com a posição para o Caso V.....	149
Figura 7.36 – Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.35, considerando as variações de ρ, v e ω_i com a posição.....	149

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 – Soluções Possíveis do Problema de Riemann.....65

Tabela 4.2 – Escolhas *a priori* de Possíveis Soluções do Problema de Riemann.....69

Lista de Símbolos

A – Constituinte

F – Redefinição da variável ρ

G – Redefinição da variável $\rho \mathbf{v}$

H_i – Redefinição da variável $\rho \omega_i$

\tilde{F}_{n+1} – Solução do problema homogêneo associado

\tilde{G}_{n+1} – Solução do problema homogêneo associado

$\tilde{H}_{i_{n+1}}$ – Solução do problema homogêneo associado

\hat{F}_n – Solução generalizada do problema de Riemann associado

\hat{G}_n – Solução generalizada do problema de Riemann associado

$\hat{H}_{i_{n+1}}$ – Solução generalizada do problema de Riemann associado

D – Estado à direita

E – Estado à esquerda

f – força externa por unidade de massa

$[[f]]$ – salto da grandeza f

p – pressão termodinâmica

r_i – taxa de produção da espécie i por unidade de volume devido a reações químicas

\mathbf{t} – vetor tensão

\mathbf{T} – tensor tensão

\mathbf{v} – velocidade média da mistura

\mathbf{v}_i – velocidade média da espécie i na mistura

ξ – variável de similaridade

Δx – largura de cada degrau

θ_n – número escolhido aleatoriamente no intervalo $(-1/2, +1/2)$

\mathfrak{R}_i – i -ésimo invariante de Riemann

s_j – velocidade de propagação do salto

ρ_i – massa específica do constituinte i

ρ – massa específica da mistura

ρ_* – massa específica do estado intermediário

ω_i – concentração do i -ésimo poluente – razão entre ρ_i e ρ

λ_j – j -ésimo autovalor

RESUMO

Este trabalho utiliza um procedimento alternativo para lidar com uma classe de sistemas hiperbólicos não lineares, empregando um modelo preliminar para descrever o movimento de poluentes em uma atmosfera, representado por um sistema hiperbólico não linear de $m+2$ equações diferenciais parciais, a saber: conservação de massa e momentum para uma mistura com múltiplos componentes de gases e ar e m equações de balanço de massa para os gases.

A simulação deste sistema segue um procedimento sistemático, tratando um problema simultâneo como um problema seqüencial, através da fatoração do operador em uma parte ordinária não homogênea (dependente do tempo) e o operador hiperbólico homogêneo associado. Este último é simulado por um esquema de Glimm de evolução no tempo, especificamente indicado para a simulação de problemas hiperbólicos, apresentando precisão assegurada matematicamente, baseado em uma teoria com sólido embasamento termodinâmico. Este esquema é o que melhor preserva a identidade do choque, isto é, a magnitude e a posição da onda de choque. Entretanto, além de sua limitação a problemas unidimensionais, sua implementação requer a solução completa, ou aproximada, do problema de Riemann associado.

Neste trabalho emprega-se um aproximante de Riemann – buscando evitar a exigência de uma solução completa do problema de Riemann associado – para cada dois passos consecutivos, aproximando, assim a solução do problema de Riemann associado por funções constantes por partes, sempre satisfazendo a condição de salto sem, necessariamente, satisfazer a condição de entropia. Comparações entre os resultados obtidos através da solução exata do problema de Riemann associado com aqueles obtidos pelo aproximante de Riemann mostram o bom desempenho desta metodologia.

ABSTRACT

This work employs an alternative procedure to deal with a class of nonlinear hyperbolic systems, using a preliminary model to describe pollutants motion in an atmosphere, represented by a nonlinear hyperbolic system of $m+2$ partial differential equations: mass and momentum conservation for the multicomponent mixture of gases and air and m mass balance equations for the gases.

This system simulation follows a systematic procedure, treating a simultaneous problem as a sequential one by splitting the operator into a non-homogeneous (time-dependent) ordinary part and the homogeneous associated hyperbolic operator. This latter is treated by a Glimm's scheme for evolution in time, specifically indicated for simulating hyperbolic problems presenting mathematically ensured accuracy, based on a theory with solid thermodynamic basis. It is the scheme that better preserves the shock identity i.e. shock wave magnitude and position. However, besides its limitation to one-dimensional problems, its implementation requires the complete solution, or approximation, of the associated Riemann problem.

In this work an approximate Riemann solver is employed – circumventing the requirement of a complete solution of the associated Riemann problem – for each two consecutive steps, which approximates the solution of the associated Riemann problem by piecewise constant functions, always satisfying the jump condition, but not necessarily the entropy condition. Comparison among results obtained by employing an exact solution of the associated Riemann problem with this Riemann solver results has shown the good performance of the latter strategy.

Capítulo 1

Introdução

1.1. Considerações Gerais

Desde a sua criação em 1988, pela Organização Meteorológica Mundial (OMN) e pela United Nations Environment Programme (UNEP), um dos principais objetivos do Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas (IPCC) é o de produzir informações científicas através de relatórios, que são divulgados periodicamente, baseados na revisão de pesquisas de 2500 cientistas de todo o mundo, sobre mudanças climáticas, impactos, vulnerabilidade e formas de adaptação dos sistemas biológicos e físicos a essas mudanças e meios de reduzir a emissão/concentração na atmosfera de gases de efeito estufa.

De acordo com estes relatórios, o aquecimento global é resultado do lançamento excessivo de gases de efeito estufa (GEEs), sobretudo o dióxido de

carbono CO_2 , na atmosfera. Eles são lançados na atmosfera principalmente pela queima de combustíveis fósseis (como petróleo, carvão e gás natural) e o desmatamento, que no Brasil é o principal responsável por nossas emissões de GEEs. Ao desmatar, muitas pessoas queimam a madeira que não apresenta valor comercial e o gás carbônico contido na fumaça proveniente das queimadas sobe para a atmosfera e se acumula a outros gases aumentando desta forma o efeito estufa. Estudado há muitos anos, ver, por exemplo, o trabalho de Perkins, datado de 1974 [1], a denominação vem de uma analogia originada no fato do vidro de uma estufa também ser transparente para radiações com baixo comprimento de onda e ser opaco à radiação de altos comprimentos de onda emitida no interior da estufa.

A concentração atmosférica de dióxido de carbono (CO_2), metano (CH_4) e óxido nitroso (N_2O) tem aumentado significativamente como resultado das atividades humanas desde 1750, devido principalmente à queima de combustível fóssil e mudanças de uso da terra, enquanto o metano e o óxido nitroso são, principalmente, devidos à agricultura. No início da revolução industrial a concentração de CO_2 na atmosfera era de 280 ppmv (partícula por milhão por volume); no início da década de 1990 era de aproximadamente 350 ppmv [2].

Um estudo das causas e conseqüências da poluição atmosférica requer a compreensão do mecanismo de transporte de radiação térmica. A radiação solar, normalmente modelada como radiação de corpo negro apresenta um comportamento distinto da radiação que alcança o espaço partindo da terra (situada na região de radiação infravermelha). Processos de combustão produzem dióxido de carbono e cerca de metade do dióxido de carbono produzido permanece na atmosfera, provocando seu gradual aumento no meio ambiente. Além disso, como sua maior absorção da radiação ocorre na faixa infravermelha – longos comprimentos de onda, o

dióxido de carbono atua no sentido de refletir a radiação que deixa a terra, limitando muito a parcela que atinge o espaço [1].

Além da presença de dióxido de carbono na atmosfera, verifica-se a presença das partículas poluentes líquidas e sólidas de dimensões muito pequenas que podem ser provenientes de emissões de veículos (ex: chumbo finamente dividido) ou de indústrias e uma de suas manifestações comuns ocorre no sentido de iniciar e controlar precipitações pluviométricas. Além disso, outro fator relevante é o aumento da temperatura da superfície terrestre, causado pela dissipação de calor proveniente de atividades industriais, que afeta o ciclo de evaporação e condensação da água e o tamanho das calotas polares, o qual, por sua vez irá afetar o nível dos oceanos [3]. Desta forma, mudanças na quantidade de gases associados ao efeito estufa e aerossóis, na radiação solar e nas características da superfície da Terra vêm alterando a dinâmica do sistema climático. Alterações na composição atmosférica, com altas taxas de material particulado, influencia não só a qualidade do ar como também as condições meteorológicas, colocando em risco as condições de sobrevivência de toda a biosfera.

Em fevereiro de 2007 o IPCC divulgou os resultados de seu Quarto Relatório de Avaliação das Mudanças Climáticas do planeta, chamado de IPCC-ARA [4], que alertam para um aumento médio global das temperaturas entre $1,8^{\circ}\text{C}$ e $4,0^{\circ}\text{C}$ até 2100, podendo este aumento ser ainda maior ($6,4^{\circ}\text{C}$) se a população e a economia continuarem crescendo rapidamente e se for mantido o consumo intenso dos combustíveis fósseis.

As conseqüências do aquecimento global podem ser sentidas em diversas partes do planeta como o aumento da intensidade de eventos climáticos extremos como furacões, tempestades tropicais, inundações, ondas de calor e seca, além do

aumento do nível do mar devido ao derretimento das calotas polares e o aumento da temperatura média do planeta em $0,8^{\circ}\text{C}$ desde a Revolução Industrial.

Os fluxos atmosféricos transportam e difundem os poluentes através do efeito de dispersão e são definidos como sendo a soma da contribuição de dois fatores: o transporte devido à advecção, associado aos efeitos de grande escala, e aquele devido à difusão turbulenta, associado aos efeitos da microescala.

O estudo da dispersão de poluentes pode ser realizado utilizando-se modelos Eulerianos ou Lagrangianos. No modelo Euleriano, a evolução da concentração de uma substância, no espaço e no tempo, é descrita em relação a um sistema de coordenadas fixas, devendo satisfazer a um balanço material de elementos de volume do domínio. Na descrição Lagrangiana, por sua vez, a evolução da concentração, considera partículas que representam porções de massa da substância que são conduzidas pelo escoamento. No Capítulo 2 discute-se um pouco mais este conceito.

A simulação do movimento de um poluente permite compreender o comportamento de partículas emitidas na atmosfera favorecendo o desenvolvimento de novos processos e produtos, como forma de investigar os impactos ambientais causados por este fenômeno.

A simulação do transporte de poluentes na atmosfera possui uma história recente, cujo avanço ocorreu após o surgimento da meteorologia, que se originou da necessidade humana de desenvolver a agricultura e prever desastres naturais como enchentes.

Nesta tese, foi empregado um modelo hiperbólico para modelar o transporte de poluentes em um ambiente representando uma atmosfera, no qual esta última é modelada como um gás ideal isotérmico e os poluentes são transportados radialmente.

A taxa de produção ou destruição deste devido a reações químicas será considerada no modelo adotado.

A descrição matemática do problema é representada, assim, por um sistema hiperbólico não linear de equações diferenciais parciais no qual se emprega um modelo simplificado para as equações de conservação de massa e de momentum linear para a mistura ar-poluentes, combinadas a balanços de massa para os poluentes, apresentada em Slattery [5]. Além disto, supõe-se muito pequena a quantidade dos poluentes presentes na mistura o que permite aproximar as equações do balanço de massa e momentum da mistura pelos balanços para o ar apenas. Esta hipótese possibilita definir ρ como a densidade do ar, \mathbf{v} sua velocidade, p e \mathbf{g} como a pressão e aceleração da gravidade, respectivamente, atuando sobre o ar.

Neste contexto, as incógnitas do problema são a densidade do ar, sua velocidade e as concentrações dos poluentes, sendo todas funções tanto da posição espacial \mathbf{x} como do tempo t . O sistema homogêneo associado ao problema hiperbólico é aproximado numericamente pelo método de Glimm [6], [7], construído especificamente para tratar problemas onde ocorrem soluções descontínuas. Sua principal característica é a capacidade de preservar a magnitude e a posição das ondas de choque. Para tratar a parte não homogênea do operador hiperbólico, será empregada uma técnica de partição do operador. Essencialmente, o problema original – um problema simultâneo – será tratado como um problema seqüencial.

O método de Glimm é um procedimento numérico que requer o conhecimento prévio da solução completa do problema de Riemann associado para gerar soluções aproximadas para as equações hiperbólicas sujeitas a condições iniciais arbitrárias. Este método é bastante adequado para a solução de sistemas hiperbólicos não lineares, uma vez que preserva a magnitude e a posição dos choques. Por outro lado, sua

aplicação é restrita a problemas unidimensionais. A técnica de partição do operador consiste em decompor este último em uma parte puramente hiperbólica, representada pelo problema homogêneo associado ao problema original, evoluindo tanto no espaço como no tempo e outra parte representada por um sistema de equações diferenciais ordinárias evoluindo somente no tempo. Essencialmente, esta técnica numérica trata um problema simultâneo de forma seqüencial: o operador definido no sistema hiperbólico é decomposto em duas partes, sendo o problema homogêneo associado (parte hiperbólica do operador) separado do problema puramente evolutivo no tempo.

Em Martins-Costa e Saldanha da Gama [8], a descrição matemática de um modelo simplificado para o transporte de um poluente em uma atmosfera isotérmica deu origem a um sistema hiperbólico não linear de três equações, que foi aproximado empregando-se o esquema numérico de Glimm. Neste mesmo trabalho é apresentada uma discussão completa do sistema e do problema de Riemann associado, onde inclui-se sua solução completa. Em Saldanha da Gama e Martins Costa [9] é proposta uma forma alternativa para a implementação do esquema de Glimm: um aproximante de Riemann, que é aplicado a um problema de transporte de um poluente na atmosfera em Martins Costa et al [10]. A comparação dos resultados obtidos utilizando este aproximante com a solução exata do problema de Riemann associado mostrou o bom desempenho do aproximante. Num trabalho subsequente, Porto et al [11], foram considerados m poluentes (gerando um sistema hiperbólico não linear não homogêneo de $m+2$ equações) cuja simulação combinou a técnica de fatoração do operador – para lidar com a porção não homogênea do operador hiperbólico – com o esquema de Glimm, utilizando um aproximante de Riemann (ao invés do procedimento usual para implementar o esquema de Glimm e avançar no tempo: a solução completa do problema de Riemann associado). O procedimento alternativo utilizado consiste em

aproximar a solução do problema de Riemann associado por funções constantes por partes, sempre satisfazendo a condição de salto. Esta aproximação, além de ter implementação mais fácil, tem um custo computacional muito menor, já que não requer escolhas de soluções.

1.2. Revisão Bibliográfica

A descrição de grande parte dos fenômenos de transporte envolve a aplicação de equações diferenciais parciais elípticas ou parabólicas que, em geral, admitem soluções regulares e cujas simulações são implementadas através de métodos numéricos conhecidos, tais como elementos finitos, volumes finitos ou diferenças finitas.

Os sistemas hiperbólicos, por outro lado, permitem uma descrição mais realista de certos fenômenos de transporte, como o escoamento de fluidos compressíveis não viscosos ou o escoamento através de meios porosos não saturados, uma vez que a propagação de qualquer quantidade ou informação presente nestes fenômenos pode ser caracterizada por uma velocidade finita. No entanto, tais sistemas podem não admitir soluções regulares, mas sim soluções descontínuas, que se caracterizam por soluções generalizadas envolvendo ondas de choque, o que requer o emprego de ferramentas numéricas específicas tais como o esquema de Glimm [6] ou o esquema de Godunov [12] para tratar a natureza descontínua do problema. Assim, um dos grandes desafios que envolvem o tratamento de soluções descontínuas reside no fato de técnicas analíticas eficientes que predominam na teoria de equações

diferenciais parciais dissipativas não poderem ser diretamente aplicadas àquelas situações.

O estudo matemático de soluções descontínuas teve início com o trabalho pioneiro de Riemann [13], que primeiro resolveu um problema de valor inicial, conhecido como problema de Riemann, para as equações isoentrópicas unidimensionais de Euler, cuja aplicação é bastante frequente na solução de diferentes problemas de dinâmica de gases. Além de sua importância na solução de tais problemas, ele desempenha um papel essencial tanto na teoria de leis de conservação hiperbólicas como na análise numérica e computacional de soluções descontínuas.

Inúmeros métodos para resolver as equações de Euler foram propostos desde o início dos anos cinquenta quando Courant et al. [14] e Lax [15] desenvolveram métodos de primeira ordem de precisão, sendo este último um dos primeiros a utilizar a idéia de diferenças finitas para provar a existência de soluções fracas, obtendo soluções auto-similares para o problema de Riemann e o conceito de admissibilidade para choques, o qual hoje leva seu nome. Posteriormente, diversos outros métodos foram propostos como os de Lax e Wendroff [16] e MacCormack [17]. Estes métodos explícitos citados foram desenvolvidos empregando esquemas centrados e ambos apresentam segunda ordem de precisão no tempo e no espaço. Entretanto, os esquemas centrados não levam em consideração as características físicas de direção de propagação de informações presentes no escoamento.

Os métodos que consideram tais características são aqueles que utilizam discretizações espaciais de acordo com o comportamento do escoamento e são conhecidos como esquemas *upwind*. A principal importância do estudo dos esquemas *upwind* reside no fato destes oferecerem bons resultados na análise de problemas que

envolvam descontinuidades como as ondas de choque que surgem nos escoamentos com alta velocidade.

Em seu artigo clássico de 1959, Godunov [12] propôs um esquema *upwind* de primeira ordem de precisão, como uma extensão aos métodos desenvolvidos por Courant et al. [14] para sistemas hiperbólicos não lineares de leis de conservação, no qual resolve um problema de Riemann exato para cada intervalo da malha, em função das descontinuidades dos valores das variáveis de estado nas interfaces desta mesma malha. Nesta mesma linha, podemos citar os esquemas de Engquist e Osher [18], Osher [19] e Roe [20], que são métodos de separação de diferenças de fluxos.

Em 1965, Glimm [6] introduziu o Método de Escolha Aleatória (Random Choice Method). Este esquema surge como uma prova construtiva da existência de soluções para uma classe de sistemas hiperbólicos não lineares de leis de conservação, onde se provou a existência global de soluções para estes sistemas. Em 1976, Chorin [7] implementou com sucesso uma versão modificada deste esquema como uma ferramenta computacional para resolver as equações de Euler de dinâmica de gases.

Em 1979, van Leer [21], seguindo o conceito do método de Godunov [12], propôs uma aproximação linear das variáveis de estado em cada célula da malha, resultando em um esquema de segunda ordem de precisão.

A partir da metade do século passado, o estudo analítico da teoria de leis de conservação teve um grande desenvolvimento devido a renomados matemáticos, como Eberhard Hopf [22], um dos precursores na utilização do método de viscosidade nula, seguido por Oleinik [23], que provou existência, unicidade, comportamento assintótico e decaimento de soluções para equações escalares em uma variável espacial.

Mais recentemente, podemos citar os trabalhos de Constantin Dafermos [24] e outros renomados matemáticos mundiais na área de leis de conservação, dentre eles, Frid e Chen [25] e Denis Serre [26].

Atualmente, vários matemáticos chineses têm dado relevantes contribuições ao problema de Riemann e problemas correlatos. Basta ver, por exemplo, os trabalhos de Gu et al. [27] e Ding et al. [28], bem como as contribuições mais recentes em Chang e Hsiao [29], Ding e Liu [30], Li et al. [31] e Li e Yu [32].

1.3. Descrição do Trabalho

O objetivo desta tese é propor um aproximante para o problema de Riemann que permita construir um procedimento simples e eficiente para a simulação de sistemas hiperbólicos de forma que não seja necessário conhecer (ou escolher) a priori a solução completa do problema de Riemann associado. Esta solução é aproximada por funções constantes por partes, satisfazendo as condições de salto, porém, não necessariamente a condição de entropia. O procedimento proposto, empregado para fornecer as soluções do problema de Riemann, requeridas na implementação do esquema de Glimm, combinado a uma técnica de partição do operador, conveniente para tratar a parte não homogênea do operador hiperbólico, é uma metodologia adequada para simular sistemas hiperbólicos. Algumas simulações de transporte de poluentes na atmosfera foram implementadas para exemplificar a metodologia utilizada.

No Capítulo 2, apresentam-se as equações básicas da dinâmica de fluidos e o modelo mecânico que descreve matematicamente o problema da dispersão de

poluentes na atmosfera, através de conceitos e definições das leis físicas que governam esse fenômeno. Neste trabalho, considerou-se a atmosfera modelada como um gás ideal isotérmico, os poluentes transportados radialmente e levou-se em conta a taxa de produção ou destruição de poluentes, devido a reações químicas.

No Capítulo 3 foram discutidos alguns conceitos que envolvem o tratamento e a solução de sistemas hiperbólicos não lineares de leis de conservação tais como solução fraca, solução entrópica, unicidade e condição de descontinuidade.

No Capítulo 4 é apresentado o problema de Riemann, onde se discutem os conceitos que envolvem a sua solução tais como campo característico, ondas de rarefação, ondas de choque e ondas de contato e descreve-se o problema de Riemann associado ao sistema hiperbólico estudado neste trabalho, visto que o sistema homogêneo correspondente ao problema original foi aproximado com o emprego do método de Glimm que requer o conhecimento prévio da solução completa (ou de sua aproximação) do problema de Riemann associado. Apresenta-se, também, neste capítulo a solução generalizada do nosso problema.

No Capítulo 5 é apresentado o aproximante de Riemann proposto, juntamente com o seu conceito físico e a descrição do método para resolvê-lo.

No Capítulo 6 descreve-se o esquema de partição do operador, empregado na aproximação numérica do problema tratado neste trabalho, cuja metodologia consiste em transformar o problema originalmente simultâneo em um problema seqüencial, permitindo, desta forma, que o problema homogêneo associado (aproximado pelo esquema de Glimm) e o problema evolutivo no tempo, no qual se considera a parte não homogênea do operador hiperbólico sejam resolvidos seqüencialmente.

No Capítulo 7 foram discutidos os resultados obtidos através de algumas simulações implementadas, utilizando o aproximante de Riemann proposto, que é comparado com a solução clássica do problema.

Finalmente, no Capítulo 8, são apresentadas as conclusões e as principais contribuições deste trabalho para estudos futuros.

Capítulo 2

Descrição Matemática do Problema

2.1. Introdução:

A dinâmica dos fluidos é uma área da Mecânica do Contínuo caracterizada por uma dependência explícita entre o tensor tensão de Cauchy e o tensor taxa de deformação – que representa a parte simétrica do tensor gradiente de velocidades. A aplicação de métodos numéricos na resolução de problemas provenientes da dinâmica de fluidos origina a área denominada Dinâmica de Fluidos Computacional, uma linha de pesquisa fortemente explorada nos últimos anos, em função de sua crescente aplicação nas mais diversas áreas da Engenharia e, em especial, a Engenharia Mecânica. Como exemplos, podem ser citados o estudo de fenômenos atmosféricos tais como ciclones e tornados.

A modelagem dos fenômenos em dinâmica de fluidos consiste numa combinação das equações de continuidade e de quantidade de movimento linear com uma relação constitutiva para o tensor tensão de Cauchy, originando um sistema de equações diferenciais parciais, sujeito a condições iniciais e de contorno. Estes problemas, em geral, não apresentam uma solução analítica, o que leva ao emprego de recursos de análise numérica e de métodos numéricos, com o objetivo de se obter uma aproximação para a solução do problema original.

Este trabalho estuda o transporte de poluentes na atmosfera utilizando um modelo mecânico simplificado usual [5] que combina os balanços de massa e momentum linear para uma mistura ar-poluentes – as equações clássicas de dinâmica dos gases – com os balanços de massa dos m poluentes. Hipóteses constitutivas são empregadas para o tensor tensão de Cauchy e para um termo de fonte/sorvedouro dos poluentes, numa primeira aproximação para a simulação de reações químicas.

O estudo de fenômenos de transporte, que inclui transferência de momentum, energia, massa, entre outras formas, tem grande importância em engenharia. Algumas relações simplificadas ajudam a explicar fisicamente esses processos de transferência, que ocorrem a partir de uma busca por um estado de equilíbrio [33]. Por exemplo, a transferência de calor ocorre devido a um gradiente de temperaturas, sendo o fluxo de calor definido como a taxa de energia transferida devido a um gradiente de temperaturas, no sentido oposto ao do gradiente de temperaturas (casos isotrópicos). Outro exemplo seria uma pequena quantidade de perfume vaporizada no ar – o processo de transferência de massa causa a difusão do perfume no ar até que seja atingida uma concentração uniforme. No escoamento de um fluido viscoso, as tensões viscosas (ligadas ao atrito viscoso) estão relacionadas com o fluxo de momentum de um sistema, a transmissão de calor está relacionada à taxa de variação de energia

interna do sistema e a transferência de massa pode ser relacionada à taxa de variação de composição de uma mistura, devido ao transporte de um ou mais constituintes dessa mistura.

Pode-se fazer uma analogia entre três leis – que essencialmente definem propriedades de uma substância. A primeira seria a clássica lei de Newton da viscosidade – deduzida para um escoamento bastante simples: aquele que ocorre entre duas placas planas paralelas (uma em repouso e outra movendo-se com velocidade constante) com validade para escoamentos de fluidos newtonianos: $\tau_{ji} = -\mu \partial v_i / \partial x_j$. Neste caso, observa-se que a tensão de cisalhamento (τ_{ji}) é proporcional ao gradiente de velocidades ($\partial v_i / \partial x_j$), sendo a constante de proporcionalidade dada pela viscosidade (μ). A tensão de cisalhamento pode ser interpretada como uma transferência de momentum, ou seja, devido ao gradiente de velocidades, a camada de fluido vizinha à placa que se move possui mais momentum na direção do escoamento que as camadas mais distantes. O sinal negativo indica que a transferência de momentum ocorre na direção de potencial decrescente. Define-se uma viscosidade cinemática: $\nu = \mu / \rho$, sendo ρ a densidade do fluido, constante no caso incompressível, quando tem-se a seguinte relação: $\tau_{ji} = -\nu \partial(\rho v_i) / \partial x_j$.

A segunda lei seria a lei de Fourier para a condução de calor – empiricamente deduzida a partir de uma placa sólida infinita inicialmente à temperatura T_0 , cujo plano superior é mantido a T_0 , enquanto o plano inferior é subitamente submetido a uma temperatura $T_1 > T_0$, sendo T_0 e T_1 suficientemente próximas para evitar outras mudanças nas propriedades do sólido. A lei de Fourier: $(q/A)_j = -k \partial T / \partial x_j$ estabelece uma proporcionalidade direta entre o gradiente de temperaturas ($\partial T / \partial x_j$) e a taxa de energia transferida por unidade de área $(q/A)_j$ através do sólido, na

direção perpendicular às superfícies superior e inferior, sendo a constante de proporcionalidade dada pela condutividade térmica k . O sinal negativo vem do fato da transferência de energia ocorrer da região com maior temperatura para a região com menor temperatura, de acordo com a segunda lei da termodinâmica. Define-se, por conveniência, a difusividade térmica: $\alpha = k / \rho c$, sendo c o calor específico, que permite obter, no caso de calor específico constante: $(q / A)_j = -\alpha \partial(\rho e) / \partial x_j$, sendo ρe a energia interna por unidade de volume.

A terceira lei seria a lei de Fick da difusão, que pode ser empiricamente definida a partir de duas placas paralelas com ar seco entre elas, sendo a placa inferior coberta com uma gaze e a superior revestida por uma camada de uma substância higroscópica, capaz de absorver todo o vapor d'água que entrar em contato com ela. Subitamente a gaze da placa inferior é colocada em contato com água, de forma a ter-se a densidade parcial do vapor d'água na superfície molhada mantida a um valor $c_{\omega 0}$. A difusão ocorre até ser atingido o regime permanente. Na placa superior a concentração do vapor d'água na superfície é mantida como $c_{\omega} = 0$. Fick verificou experimentalmente que a taxa de difusão do vapor d'água $(j_{\omega} / A)_j$ era diretamente proporcional ao gradiente de concentração $(\partial c_{\omega} / \partial x_j)$, ou seja: $(j_{\omega} / A)_j = -D \partial c_{\omega} / \partial x_j$, sendo D o coeficiente de difusão.

Observa-se que a viscosidade cinemática, ν , a difusividade térmica, α , e o coeficiente de difusão D , são dimensionalmente semelhantes, permitindo definir números adimensionais que relacionam transferências de momentum, energia e massa. No caso de sistemas isotérmicos com transferência simultânea de momentum e massa, por exemplo, define-se o número de Schmidt: $Sc = \nu / D$, com valor aproximadamente unitário para gases, podendo assumir valores elevados para líquidos

[33]. No caso de transferência de momentum, a propriedade transferida é o momentum, ρv_i , enquanto o fluxo de momentum é dado por τ_{ji} e a difusividade por ν . Já para transferência de massa, a propriedade transferida é c_{ω} , o fluxo é j_{ω}/A e a difusividade é D .

As equações diferenciais parciais que modelam a dinâmica dos fluidos podem apresentar três tipos de comportamento: hiperbólico, parabólico e elíptico. Em geral, os problemas elípticos descrevem os fenômenos em regime permanente; os parabólicos representam os problemas transientes, envolvendo termos difusivos e sem advecção e os hiperbólicos caracterizam problemas onde as informações se propagam com velocidade finita.

Sistemas hiperbólicos de equações diferenciais parciais são empregados para modelar inúmeros fenômenos físicos que surgem nas mais diversas áreas como dinâmica dos gases, acústica, geofísica, entre outras, que envolvem, por exemplo, o transporte advectivo de substâncias, onde a característica típica de propagação de singularidades está presente.

A descrição matemática de um fenômeno físico, em particular o movimento de fluidos, deve levar em consideração o nível de aproximação necessário ao estudo das propriedades de interesse. Esta questão está associada à escolha da escala na qual se pretende estudar o sistema. No caso do estudo de fluidos, temos a escala microscópica e a escala macroscópica. Na dinâmica de gases, a primeira escala requer uma análise estatística, baseada nas leis da teoria cinética e física estatística, cuja descrição permite tratar variáveis, tais como temperatura e pressão como médias estatísticas de grandezas macroscópicas.

Sob o ponto de vista macroscópico, a interação entre um número suficientemente grande de partículas (átomos e moléculas) influencia o movimento

individual de cada partícula, onde podemos considerar a densidade de partículas suficientemente alta, que possibilite tratar tal sistema (fluido) como um contínuo. Nesta escala, uma partícula de fluido é uma porção de fluido pequena, mas suficientemente grande para permitir a definição de médias de grandezas microscópicas. Por exemplo, a energia cinética microscópica, que é traduzida pela temperatura.

2.2. Descrição Euleriana e Descrição Lagrangeana do Movimento

Considere o movimento de uma partícula (ponto material) fluida. As trajetórias das partículas podem ser descritas pela equação:

$$\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t) \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$ representa a posição na configuração de referência da partícula em observação. Logo, no espaço tridimensional, temos, juntamente com a variável temporal, as chamadas coordenadas Lagrangeanas (\mathbf{X}, t) . A descrição acima caracteriza a posição da partícula que ocupa a posição \mathbf{X} na configuração de referência no instante t . No entanto, quando investigamos o movimento do fluido, não estamos interessados no movimento de uma determinada partícula fluida. Na descrição do movimento de um fluido, usualmente trabalha-se com as chamadas coordenadas Eulerianas (\mathbf{x}, t) , que estão associadas à configuração atual do corpo. A distribuição de velocidades num meio contínuo é obtida a partir da derivada do campo χ (o movimento), dada por:

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \chi(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \quad (2.2)$$

Seja F uma quantidade física qualquer (temperatura, densidade, etc) transportada pelo movimento das partículas em um fluido. Segundo a descrição Lagrangeana, esta quantidade é vista como $\hat{F}(\mathbf{X}, t)$. Por outro lado, na descrição Euleriana, a quantidade é representada por uma função $\tilde{F}(\mathbf{x}, t)$, que denota o valor desta mesma quantidade no ponto \mathbf{x} , no tempo t . Assim, descrevendo o caminho de uma partícula fluida definido pela equação (2.1), pode-se expressar a taxa de variação da quantidade $\tilde{F}(\mathbf{x}, t)$ como

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{F}[\chi(\mathbf{X}, t), t] = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{F}(\mathbf{x}, t) + (\text{grad } \tilde{F}(\mathbf{x}, t)) \cdot \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) \quad (2.3)$$

A taxa de variação da quantidade F , representada acima é denominada derivada material, ou seja,

$$\frac{d}{dt} F := \underbrace{\frac{\partial F}{\partial t}}_{\text{derivada local}} + \underbrace{(\text{grad } F) \cdot \mathbf{v}}_{\text{derivada convectiva}} \quad (2.4)$$

onde a derivada local vem da dependência explícita de F em relação ao tempo e a derivada convectiva ocorre devido ao transporte da quantidade F em função do movimento do fluido.

2.2.1. Derivada Material Seguindo a Partícula da Espécie A

Um corpo (um constituinte) da espécie i é um conjunto formado por elementos da espécie i , também denominados pontos materiais do constituinte i , que, por abuso de notação, são denominadas partículas. A representação do movimento de uma mistura pode ser representado por uma transformação contínua do espaço euclidiano \mathcal{E} nele próprio, parametrizada pelo tempo $t \in [0, \infty)$: $\chi_i: \mathcal{B}_i \times \mathbf{R}^+ \rightarrow \mathcal{E}$, onde \mathcal{B}_i

denota um corpo composto pelo i -ésimo constituinte da mistura, χ_i uma transformação regular inversível referida como seu movimento e $t = 0$ um instante inicial arbitrário. Um corpo da espécie i - \mathcal{B}_i - é um conjunto cujos elementos τ_i são as partículas materiais da espécie i .

A configuração do corpo da espécie A , χ_A , é definida como uma função contínua biunívoca do corpo da espécie i numa região do espaço euclidiano de pontos ε , parametrizado pelo tempo $t \in [0, \infty)$, constituindo uma família de configurações, tal que:

$$\mathbf{x} = \chi_i(\tau_i, t_0) \quad \text{ou} \quad \tau_i = \chi_i^{-1}(\mathbf{x}, t_0) \quad (2.5)$$

onde χ_i^{-1} indica o mapeamento inverso de χ_i .

Assim, em uma dada configuração da espécie i , cada ponto \mathbf{x} do espaço euclidiano ε é ocupado por uma única partícula τ_i do corpo da espécie i e cada partícula τ_i do corpo da espécie i está localizado num único ponto \mathbf{x} de ε . Desta maneira, escolhendo um ponto o de ε como origem, o vetor posição é $\mathbf{x} = x \hat{\mathbf{e}}$.

A configuração de Referência χ_{i_R} representa a configuração utilizada para identificar as partículas do corpo da espécie i . Embora não se possa confundir o corpo da espécie i com uma de suas configurações, é conveniente estudá-lo em uma delas. Posições numa configuração particular servem para especificar as partículas da espécie i que formam o corpo. A configuração de referência pode ser uma região efetivamente ocupada pelo corpo durante seu movimento, onde cada partícula pode ser caracterizada a partir da sua posição na configuração de referência, isto é,

$$\mathbf{x}_{R_i} = \chi_{i_R}(\tau_i) \quad \text{onde} \quad \tau_i = \chi_{i_R}^{-1}(\mathbf{x}_{R_i}) \quad (2.6)$$

Aqui, \mathbf{x}_{R_i} é a posição da partícula do corpo da espécie i na configuração de referência χ_{i_R} . Se χ_{i_R} é um movimento do corpo da espécie i na configuração de referência χ_{i_R} , então tem-se:

$$\mathbf{x} = \chi_i(\tau_i, t) = \chi_i[\chi_{i_R}^{-1}(\mathbf{x}_i), t] \quad (2.7)$$

Definindo $\chi_i^0(\mathbf{x}_{R_i}, t) \equiv \chi_i[\chi_{i_R}^{-1}(\mathbf{x}_{R_i}), t]$, tem-se:

$$\mathbf{x} = \chi_i^0(\mathbf{x}_{R_i}, t) \quad (2.8)$$

Logo, se um corpo da espécie i descreve um movimento χ_i^0 , \mathbf{x} representa a posição da partícula no instante de tempo t . Neste caso, a derivada material seguindo a partícula da espécie i é dada por:

$$\frac{d_i \phi}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} [\phi(\mathbf{x}_{R_i}, t)] \quad (2.9)$$

onde $\mathbf{x}_{R_i} = \chi_{i_R}(\tau_i)$ define a partícula da espécie i .

Se ϕ é um campo escalar $\phi = \phi(\mathbf{x}_{R_i}, t)$, então,

$$\frac{d_i \phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \phi \cdot \mathbf{v}_i \quad \text{onde } \phi = \phi(\mathbf{x}, t) \quad (2.10)$$

Se ϕ é um campo vetorial, então,

$$\frac{d_i \phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + [\nabla \phi] \mathbf{v}_i \quad \text{onde } \phi = \phi(\mathbf{x}, t) \quad (2.11)$$

onde a velocidade do constituinte i , representando a taxa de variação no tempo da posição ocupada por uma partícula da espécie i , é dada por

$$\mathbf{v}_i = \frac{d_i \mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} [\chi_i(\tau_i, t)] = \frac{\partial}{\partial t} [\chi_A(\chi_{i_R}^{-1}(\mathbf{x}_i), t)] \quad (2.12)$$

2.3. Teorema do Transporte de Reynolds

A transformação relacionando as descrições formulações euleriana e lagrangeana é feita empregando-se um importante teorema cinemático, derivado da identidade de Euler [34], conhecido como teorema de transporte de Reynolds [35].

Seja $F: \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável e o mapeamento $\varphi: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, também continuamente diferenciável. Considere o transporte de uma quantidade F , uma região de espaço $\Omega(t)$ na configuração atual num instante t – coincidente com a região fechada limitada pela superfície $\partial\Omega(t)$ e seja \mathbf{v} a velocidade de uma partícula material. Então, para cada $\Omega(t)$,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} F dV = \int_{\Omega(t)} \left[\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad } F + F \text{ div } \mathbf{v} \right] dV \quad (2.13)$$

A igualdade (2.13) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} F dV = \int_{\Omega(t)} \left[\frac{dF}{dt} + F \text{ div } \mathbf{v} \right] dV \quad (2.14)$$

Empregando a definição de derivada material (2.4) e o teorema da divergência, chega-se, a partir da igualdade (2.13), ao teorema de transporte de Reynolds em sua forma mais usual:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} F dV = \int_{\Omega(t)} \frac{\partial F}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega(t)} F (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA \quad (2.15)$$

Onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário exterior a $\partial\Omega(t)$.

2.4. Teorema de Transporte de Reynolds para uma Região com Interface de Fases

Sejam $\Omega(t)$ o volume ocupado pelo corpo da espécie i no instante de tempo t – coincidente com uma região do espaço ocupada por uma mistura de partículas materiais Ω , e $\psi(\mathbf{x}, t)$ uma função escalar, vetorial ou tensorial da posição \mathbf{x} .

Define-se uma interface de fases Σ como sendo uma superfície não material possuindo cinemática própria, representando uma superfície divisória na qual uma ou mais grandezas físicas como a densidade ou a velocidade podem ser descontínuas. Tal superfície movimenta-se através do material com uma determinada velocidade de deslocamento. Seja \mathbf{u} a velocidade num dado ponto desta superfície, definimos $\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\xi}^+$ a velocidade medida na direção positiva $\boldsymbol{\xi}^+$ e $\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\xi}^-$ a velocidade medida na direção negativa $\boldsymbol{\xi}^-$ conforme descrito por Truesdell e Toupin [34].

Supõem-se as grandezas ψ e \mathbf{v}_i continuamente diferenciáveis nas duas regiões Ω^+ e Ω^- separadas pela interface de fases Σ , com fronteiras $\partial\Omega^+$ e $\partial\Omega^-$, respectivamente, que assim como Σ , são regiões não materiais. Assim, a taxa de variação de ψ é dada por:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi dV = \frac{d}{dt} \int_{\Omega^+} \psi dV + \frac{d}{dt} \int_{\Omega^-} \psi dV \quad (2.16)$$

Aplicando o Teorema de Transporte aos termos à direita da igualdade acima, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega^+} \psi dV &= \int_{\Omega^+} \frac{\partial \psi}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega^+} \psi \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n} dA - \int_{\Sigma} \psi^+ \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\xi} dA \\ \frac{d}{dt} \int_{\Omega^-} \psi dV &= \int_{\Omega^-} \frac{\partial \psi}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega^-} \psi \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n} dA - \int_{\Sigma} \psi^- \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\xi} dA \end{aligned} \quad (2.17)$$

Aqui, ψ^+ e ψ^- representam o limite da função ψ quando um ponto \mathbf{x} aproxima-se de um ponto \mathbf{x}_0 na interface de fases Σ e \mathbf{n} é o vetor normal unitário exterior à superfície. Definindo $[[B\xi]] \equiv B^+\xi^+ + B^-\xi^-$ como o salto de uma grandeza através de uma interface e substituindo (2.17) em (2.16), tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi \, dV &= \int_{\Omega} \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dV + \int_{\partial\Omega} \psi \mathbf{v}_A \cdot \mathbf{n} \, dA - \int_{\Sigma} [[\psi \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\xi}]] \, dA \\ &\stackrel{\text{Teor. Div}}{=} \int_{\Omega} \left[\frac{\partial \psi}{\partial t} + \text{div}(\psi \mathbf{v}_i) \right] \, dV + \int_{\Sigma} [[\psi(\mathbf{v}_i - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\xi}]] \, dA \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde os dois últimos termos após o segundo sinal da igualdade foram obtidos a partir da aplicação do Teorema da Divergência.

Pela definição de derivada material, pode-se expressar, para qualquer volume de controle arbitrário Ω e tempo t , o teorema de transporte para um corpo descontínuo da espécie i , como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi \, dV = \int_{\Omega} \left[\frac{d_i \psi}{dt} + \psi \, \text{div} \, \mathbf{v}_i \right] \, dV + \int_{\Sigma} [[\psi(\mathbf{v}_i - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\xi}]] \, dA \quad (2.19)$$

2.5 Conservação de Massa

A massa de um corpo \mathcal{B} composto por m constituintes independe do tempo. Considerando $\rho = \hat{\rho}(\mathbf{x}, t)$ sua densidade, a massa do corpo \mathcal{B} ocupando uma região Ω é dada por:

$$\mathcal{M} = \int_{\Omega} \rho \, dV \quad (2.20)$$

Logo a conservação de massa pode ser expressa como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho \, dV = 0 \quad (2.21)$$

substituindo no Teorema de Transporte, dado pela equação (2.19), tem-se

$$\int_{\Omega} \left[\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} \right] dV + \int_{\Sigma} \llbracket \rho(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\xi} \rrbracket dA = 0 \quad (2.22)$$

Como esta equação é válida para um volume Ω arbitrário, o teorema da localização [35], permite obter, para cada ponto e em cada fase, o balanço global diferencial para uma mistura de múltiplos componentes, que pode ser representado como

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0 \quad (2.23)$$

e em cada ponto e cada interface de fases, o salto global do balanço de massa a ser satisfeito é dado por

$$\llbracket \rho(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\xi} \rrbracket = 0 \quad (2.24)$$

2.5.1 Conservação de Massa para uma Espécie

A massa de um corpo da espécie i , \mathcal{M}_i é uma grandeza independente do tempo, definida por $\mathcal{M}_i = \int_{\Omega} \rho_i \, dV$, sendo $\rho_i = \hat{\rho}_i(\mathbf{x}, t)$ a densidade ou concentração mássica do constituinte i .

A teoria usual que descreve os processos de transporte em misturas fluidas considera os balanços de massa, momentum linear e angular e energia, além da desigualdade entrópica para a mistura como um todo, enquanto cada constituinte da

mistura deve obedecer à equação de balanço de massa [5]. A cada processo são dados os campos de densidades parciais, e velocidades associadas a cada uma das espécies químicas (constituintes da mistura). Com estas compõe-se a densidade total da mistura, e a velocidade média da mistura, dadas por:

$$\rho = \sum_{i=1}^m \rho_i \quad \text{e} \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^m \rho_i \mathbf{v}_i \quad (2.25)$$

Por conveniência, define-se a fração em massa do constituinte i :

$$\omega_i = \frac{\rho_i}{\rho} \quad (2.26)$$

A partir de (2.25) chega-se a outras definições importantes que são a velocidade de difusão (a velocidade do constituinte i em relação à mistura) e o fluxo difusivo de massa de um constituinte i , que são dados por:

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{v} \quad \text{e} \quad \mathbf{j}_i = \rho_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}) \quad (2.27)$$

O fluxo total de massa de cada constituinte, $\rho_i \mathbf{v}_i$, é dado pela soma de duas parcelas: uma correspondendo à convecção acompanhando o centro de massa da mistura enquanto a outra é a parcela difusiva propriamente dita.

Neste ponto, cabe um comentário acerca da difusão de massa – a clássica lei de Fick: Para processos de difusão em estado estacionário, a equação que correlaciona o fluxo de difusão \mathbf{j}_i com o gradiente de concentração $\nabla \omega_i$ é denominada lei de Fick, sendo dada por:

$$\mathbf{j}_i = -\rho D \nabla \omega_i \quad (2.28)$$

Na equação (2.28), que pode ser interpretada como uma definição do coeficiente de difusão D , o sinal negativo indica que o fluxo ocorre na direção contrária à do gradiente de concentração.

A taxa de variação no tempo da massa de um corpo da espécie i , $i = 1, 2, \dots, m$, em uma mistura de m constituintes é igual à taxa de produção de massa da espécie i devido a reações químicas. A equação do balanço de massa para a espécie i é dada por:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho_i dV = \int_{\Omega_i(t)} r_i dV + \int_{\Sigma} r_i^\sigma dA \quad (2.29)$$

onde: $\Omega = \hat{\Omega}(t)$ representa o volume ocupado pelo corpo da espécie i no instante de tempo t ; r_i a taxa de produção da espécie i por unidade de volume devido a reações químicas homogêneas; r_i^σ : taxa de produção da espécie i por unidade de área devido a reações químicas heterogêneas na interface de fases.

Aplicando o Teorema de Transporte ao termo à esquerda de (2.29), tem-se:

$$\int_{\Omega} \left[\frac{d_i \rho_i}{dt} + \rho_i \operatorname{div} \mathbf{v}_i - r_i \right] dV + \int_{\Sigma} \left\{ \left[\rho_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\xi} \right] - r_i^\sigma \right\} dA = 0 \quad (2.30)$$

Mas, para todos os pontos na interface de fases, o salto no balanço de massa para o constituinte i é tal que:

$$\left[\rho_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\xi} \right] = r_i^\sigma \quad (2.31)$$

Logo, pelo teorema da localização e pelo fato de (2.29) ser válido para qualquer volume arbitrário $\Omega(t)$, tem-se que o integrando deve ser nulo, isto é,

$$\frac{d_i \rho_i}{dt} + \rho_i \operatorname{div} \mathbf{v}_i = r_i \quad \text{ou} \quad \underbrace{\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_i \mathbf{v}_i}_{\text{equação de conservação da espécie } i} = r_i \quad (2.32)$$

Observação: A taxa de produção da espécie i , r_i , é normalmente função da composição química, temperatura, pressão, etc. Supõe-se, inicialmente, que existam dados empíricos ou alguma equação constitutiva para r_i .

A equação de balanço total de massa pode ser obtida através do somatório das m equações (2.32). Este resultado expressa a conservação de massa, demonstrando que as reações químicas podem provocar transformações entre diferentes espécies, porém, restritas pela conservação de massa total. Tal balanço é localmente válido, ou seja, válido em todos os pontos da região e não apenas na região total ocupada pelo fluido. Usando as definições de densidade e velocidade de mistura dadas pela equação (2.25) tem-se o balanço de massa para a mistura de m constituintes, ou balanço de massa global:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0 \quad (2.33)$$

e o salto do balanço de massa global:

$$\llbracket \rho(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\xi} \rrbracket = 0 \quad (2.34)$$

recuperando-se, assim, as equações (2.23) e (2.24). As equações (2.33) e (2.24) permitem verificar que $\sum_{i=1}^m r_i = 0$ e $\sum_{i=1}^m r_i^\sigma = 0$.

2.6. Balanço de Momentum Linear para uma Mistura

As equações de movimento para um corpo \mathcal{B} composto por m constituintes são postuladas a partir da aplicação do primeiro axioma de Euler à mistura. Além das forças de corpo por unidade de massa $\mathbf{f}_i(\mathbf{x}, t)$ atuando sobre cada um dos constituintes, forças externas atuando na configuração Ω do corpo, existem também as forças de contato exercidas pelo meio externo sobre a fronteira dessa configuração ($\partial\Omega$), representadas pelo vetor tensão \mathbf{t} e medidas por unidade de área de $\partial\Omega$.

Em um volume diferencial arbitrário, as forças de contato representam as forças que, devido à presença de tensões internas, agem entre partes de um corpo \mathcal{B} . A forma das forças de contato pode ser avaliada empregando-se a *hipótese de Cauchy*, um dos mais importantes axiomas da Mecânica do Contínuo. Cauchy supôs a existência de uma densidade de força de superfície $\mathbf{t} = \hat{\mathbf{t}}(\mathbf{x}, t; \mathbf{n})$, definida para cada vetor unitário normal exterior \mathbf{n} e cada (\mathbf{x}, t) na trajetória do movimento, dotado da seguinte propriedade: considerando uma superfície orientada Γ de um corpo com normal unitária exterior \mathbf{n} em \mathbf{x} , o vetor $\mathbf{t} = \hat{\mathbf{t}}(\mathbf{x}, t; \mathbf{n})$ – denominado vetor tensão – representa a força por unidade de área exercida no interior do corpo, através da superfície Γ , por seu exterior. A resultante de força e de momento da distribuição de vetores tensão \mathbf{t} é equivalente à resultante das forças exercidas pelo lado exterior de Γ no seu lado interior – representando a força de contato total exercida num corpo num dado instante e a distribuição \mathbf{t} depende linearmente orientação do elemento de superfície, além de depender da posição e do tempo.

Em síntese, o Teorema de Cauchy, supondo que todos os momentos sejam oriundos de forças de contato e de corpo, afirma que:

i) o vetor tensão é linear em relação à normal exterior, ou seja:

$$\mathbf{t} = \hat{\mathbf{t}}(\mathbf{n}; \mathbf{x}, t) = \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{x}, t) \mathbf{n}, \text{ onde } \mathbf{T} = \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{x}, t) \text{ representa o tensor tensão, denominado}$$

Tensor de Cauchy;

ii) o tensor tensão é simétrico e,

iii) satisfaz a equação de movimento: $\text{div } \mathbf{T} + \rho \mathbf{f} = \rho \dot{\mathbf{v}}$, sendo $\dot{\mathbf{v}} = d\mathbf{v} / dt$

Pelo princípio da conservação de momentum linear temos que a taxa de variação do momentum linear de um corpo composto de múltiplos componentes,

em relação a um referencial inercial, é igual a soma das forças que atuam sobre o corpo, ou seja,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} dV + \int_{\Sigma} \llbracket \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\xi} \rrbracket dA = \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} dA + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n \rho_i \mathbf{f}_i dV \quad (2.35)$$

Empregando os mesmos argumentos já utilizados na conservação de massa, utilizando a definição do tensor de Cauchy e o fato da equação (2.35) ser válida para um volume arbitrário, pode-se expressar o balanço de momento linear para uma mistura de múltiplos componentes a ser satisfeito em cada ponto, na forma local:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \text{div } \mathbf{T} + \sum_{i=1}^m \rho_i \mathbf{f}_i \quad (2.36)$$

A força externa por unidade de massa é definida por:

$$\mathbf{f} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^m \rho_i \mathbf{f}_i \quad (2.37)$$

Além disto, assume-se que, na interface de fases, o salto global do balanço de momento deve ser tal que:

$$\llbracket \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\xi} - \mathbf{T} \cdot \boldsymbol{\xi} \rrbracket = 0 \quad (2.38)$$

Uma vez que

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{t} dA = \int_{\Omega} \text{div } \mathbf{T} dV + \int_{\Sigma} \llbracket \mathbf{T} \cdot \boldsymbol{\xi} \rrbracket dA \quad (2.39)$$

A forma local da equação (2.35) para um meio contínuo poderia ser derivada diretamente do Teorema de Cauchy. Considerando a definição (2.37) e a forma local dada pela equação (2.30), tem-se:

$$\rho \underbrace{\frac{d\mathbf{v}}{dt}}_{\text{aceleração}} = \rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{v}) \mathbf{v} \right] = \underbrace{\text{div } \mathbf{T}}_{\text{forças de superfície}} + \underbrace{\rho \mathbf{f}}_{\text{forças de corpo}} \quad (2.40)$$

2.7. Balanço de Momentum Angular para uma Mistura

Pode-se definir a taxa de variação no tempo da quantidade de movimento angular de um corpo \mathcal{B} composto por m constituintes, em relação a um referencial inercial com origem \mathbf{o} , como sendo a soma dos momentos das forças que atuam sobre ele. Assumindo a hipótese não polar, que supõe que todos os torque que atuam no corpo \mathcal{B} sejam provenientes de forças atuando sobre \mathcal{B} , a equação de conservação de quantidade de movimento angular será dada por:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) dV \\ = \int_{\partial\Omega} \mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \mathbf{t}(\mathbf{x}, t; \mathbf{n}) dA + \int_{\Omega} \mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) dV \end{aligned} \quad (2.41)$$

onde $\mathbf{r} = \hat{\mathbf{r}}(\mathbf{x})$ é o vetor posição a partir da origem \mathbf{o} e a força por unidade de massa \mathbf{f} foi definida na equação (2.37).

A forma local do balanço de momentum angular é obtida combinando a definição do tensor tensão de Cauchy, definido a partir do vetor tensão: $\mathbf{t} = \hat{\mathbf{t}}(\mathbf{x}, t; \mathbf{n}) = \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{x}, t) \mathbf{n}$ e a equação de conservação de quantidade de movimento linear (2.36). Essencialmente, ela impõe a simetria do tensor de Cauchy:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T \quad (2.42)$$

O balanço de energia para a mistura não será apresentado porque o presente trabalho considera o escoamento isotérmico.

2.8. Modelo Mecânico da Dispersão de Poluentes na Atmosfera

Este trabalho descreve o transporte de m poluentes no ar, sendo este último suposto um gás ideal. O modelo matemático origina um sistema de $m+2$ equações: as equações de conservação de massa e momentum linear para a mistura ar-poluentes – as equações clássicas de dinâmica dos gases – e m equações de balanço de massa para os m poluentes. Além disso, são supostas algumas hipóteses simplificadoras explicitadas a seguir.

Primeiro, supõe-se que a transferência de massa seja causada por um processo de advecção-difusão dos m poluentes, obedecendo a uma equação constitutiva bastante simples, dada pela lei de Fick para difusão binária [5], que permite expressar o vetor fluxo de massa dos m poluentes através da equação (2.28), aqui repetida, por conveniência

$$\mathbf{j}_i = -\rho D_i \nabla \omega_i, \quad i = 1, \dots, m \quad (2.28)$$

onde D_i representa o coeficiente de difusão e $\nabla \omega_i$ o gradiente de concentração do i -ésimo constituinte. Como será mencionado a seguir, neste trabalho, que tem por objetivo simulação de sistemas hiperbólicos, a difusão será suposta desprezível em relação à advecção, portanto o processo de difusão será apresentado com menor rigor.

A segunda hipótese simplificadora consiste em supor um comportamento de gás ideal para a mistura ar-poluentes, permitindo desprezar quaisquer efeitos de viscosidade. Nesta situação, o tensor tensão de Cauchy fica reduzido a um múltiplo da identidade dado por $\mathbf{T} = -p\mathbf{I}$ com $p = \rho RT$, sendo \mathbf{I} o tensor identidade, R a constante da mistura ar-polvente, ρ sua densidade e T sua temperatura absoluta. Admite-se, ainda, que a força externa atuando na mistura seja causada somente por efeitos gravitacionais, ou seja, $\mathbf{f} \equiv \mathbf{g}$, onde \mathbf{g} é a aceleração da gravidade, suposta

constante. A hipótese de gás ideal – amplamente empregada na literatura para caracterizar o ar – é fisicamente justificada neste trabalho, que visa um modelo para a poluição ambiental. Neste sentido, a situação mais desfavorável seria obtida empregando-se um modelo hiperbólico, com a possibilidade de presença de ondas de choque. Considerar tanto a difusão de momentum (efeitos de viscosidade) quanto a difusão de massa, mudaria a natureza da equação que modela o fenômeno, atenuando as ondas de choque. Na verdade, desprezar quaisquer efeitos difusivos é fundamental para o estudo da propagação de ondas de choque. Além disso, as elevadas velocidades de propagação e os altos gradientes de pressão funcionam como uma motivação física para desprezar a difusão.

Uma simplificação muito importante pode ser introduzida no modelo se, além das hipóteses acima, for suposto que a soma das densidades de massa dos m poluentes na mistura seja pequena, comparada à densidade de massa do ar, em qualquer instante de tempo. Esta hipótese permite aproximar as equações de balanço de massa e momentum linear da mistura pelos balanços de massa e momentum linear para o ar apenas. Desta forma, define-se ρ como a densidade de massa do ar, \mathbf{v} a sua velocidade, p a pressão e \mathbf{g} a força de corpo específica atuando sobre ele.

Neste contexto, o transporte de m poluentes no ar pode ser descrito matematicamente pelo seguinte sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v}) = 0 \\ \frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} \\ \frac{\partial (\rho \omega_i)}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \omega_i \mathbf{v}) = \operatorname{div} (\rho D_i \nabla \omega_i) + r_i, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{array} \right. \quad (2.43)$$

onde ω_i representa a concentração do i -ésimo constituinte (ou fração de massa) na mistura, expresso por $\omega_i \equiv \rho_i / \rho$, sendo ρ_i a densidade de massa do i -ésimo

constituente; D_i é o coeficiente de difusão do i -ésimo constituinte. Neste trabalho, a difusão será desprezada, quando comparada à advecção. Este sistema compreende a conservação de massa para cada um dos constituintes e os balanços de massa e momentum linear para o ar. O balanço de momentum angular é sempre satisfeito, pois o tensor tensão é suposto simétrico (equação (2.42)).

Supõe-se, ainda, que a pressão seja uma função da densidade somente, ou seja, $p = \hat{p}(\rho)$ e que sua derivada seja positiva, isto é, $p'(\rho) > 0$. A hipótese da pressão não depender da temperatura pode ser justificada fisicamente para processos envolvendo pequenos intervalos de tempo, que seriam insuficientes para gerar variações apreciáveis de temperatura. A metodologia de solução do problema estudado neste trabalho requer, necessariamente, que as aproximações numéricas evoluam no tempo com passos muito pequenos.

Para o decaimento da concentração do i -ésimo constituinte na mistura será suposta a hipótese constitutiva mais simples – o decaimento será considerado linear, obedecendo à seguinte relação constitutiva:

$$r_i = -\alpha_i \omega_i \quad (2.44)$$

onde α_i é uma constante positiva.

A relação constitutiva (2.44) descreve a taxa de produção do poluente – considerando, neste caso, tanto sua geração como sua destruição, que pode ser causada por reações químicas na atmosfera.

O escoamento é suposto unidimensional, sendo o campo de velocidades, neste caso, reduzido a uma única componente na direção do escoamento, ou seja, $\mathbf{v} = v \mathbf{e}_r$, onde \mathbf{e}_r representa o vetor unitário \mathbf{i} , para geometria plana e os vetores radiais unitários, no caso de geometrias esférica e cilíndrica. Para evitar perda de simetria, serão desconsiderados, também, os efeitos gravitacionais.

Combinando (2.43)-(2.44) e as hipóteses simplificadoras mencionadas acima, o modelo matemático definido em (2.43) origina o seguinte problema de valor inicial:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial r} = -\beta \frac{\rho v}{r} \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v^2 + p)}{\partial r} = -\beta \frac{\rho v^2}{r} \\ \frac{\partial(\rho \omega_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \omega_i v)}{\partial r} = -\beta \frac{\rho v \omega_i}{r} + r_i, \quad r_i = -\alpha_i \omega_i, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{array} \right. \quad (2.45)$$

onde $\beta = 0$ se o problema for descrito no sistema de coordenadas cartesianas, $\beta = 1$ para o sistema de coordenadas cilíndricas e $\beta = 2$ para o sistema de coordenadas esféricas.

A solução do sistema de equações (2.45) requer dados iniciais para a densidade, a velocidade e a concentração dos m poluentes.

As simulações implementadas neste trabalho consideram, em geral, uma geometria esférica, sendo a casca esférica com raio interno R_i e raio externo R_e esquematizada na Figura 6.3.

Capítulo 3

Sistemas Hiperbólicos de Leis de Conservação

3.1. Introdução

Sistemas hiperbólicos de equações diferenciais parciais são empregados para modelar inúmeros fenômenos físicos que surgem nas mais diversas áreas como dinâmica dos gases, acústica, geofísica, ótica, entre outras, que envolvem, por exemplo, movimentos de onda ou o transporte advectivo de substâncias, onde a propagação de singularidades está muitas vezes presente.

A modelagem matemática de problemas que envolvem a conservação de quantidades origina certos tipos de sistemas de equações diferenciais parciais, chamadas leis de conservação.

O movimento de um fluido pode ser descrito utilizando as chamadas variáveis primitivas ou físicas como a densidade ρ , a pressão p e as três componentes da

velocidade \mathbf{v} : u, v, w , utilizando as leis fundamentais de conservação (conservação de massa, conservação de momentum linear e angular e conservação de energia).

Leis de conservação são equações que expressam a conservação de quantidades u_1, u_2, \dots, u_m , podendo ser representadas tanto na forma diferencial como na forma integral. Originalmente, as leis de conservação são expressas através de uma forma integral, visto que os axiomas são propostos para porções finitas de um corpo. A formulação integral requer menos regularidade das funções (campos), o que permite considerar funções descontínuas.

Dado um volume de controle fixo $VC = [x_E, x_D] \times [t_1, t_2]$ no plano $x-t$, a forma integral da equação de conservação de massa, no espaço unidimensional, por exemplo, é dada por:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_E}^{x_D} \rho(x, t) dx = \mathbf{f}(x_E, t) - \mathbf{f}(x_D, t) \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{f} = \rho \mathbf{u}$ é o fluxo.

3.2. Sistema Hiperbólico Linear de Leis de Conservação

Seja um sistema de leis de conservação em derivadas parciais:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0 \quad (3.2)$$

onde, $\mathbf{u} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^m$ é um vetor m -dimensional, cujas coordenadas são chamadas de variáveis de estado ou de quantidades conservadas e a função vetorial $\mathbf{f} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ é chamada de função fluxo. Em geral, as funções fluxo são funções não lineares de \mathbf{u} ,

gerando sistemas não lineares de equações diferenciais parciais, cuja solução exata nem sempre pode ser encontrada [13].

Aplicando a regra da cadeia a (3.2) obtém-se a forma quasi-linear expressa por:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial(\mathbf{u})}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial(\mathbf{u})}{\partial x} = 0 \quad (3.3)$$

onde \mathbf{A} é a matriz Jacobiana da função fluxo $\mathbf{f}(\mathbf{u})$, definida da seguinte forma:

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} = \mathbf{f}'(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \partial f_1 / \partial u_1 & \partial f_1 / \partial u_2 & \dots & \partial f_1 / \partial u_m \\ \partial f_2 / \partial u_1 & \partial f_2 / \partial u_2 & \dots & \partial f_2 / \partial u_m \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \partial f_m / \partial u_1 & \partial f_m / \partial u_2 & \dots & \partial f_m / \partial u_m \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

Considerando inicialmente o caso em que \mathbf{A} é uma matriz constante (caracterizando, assim, um sistema linear) e o sistema (3.2) é (estritamente) hiperbólico, ou seja, $\mathbf{f}'(\mathbf{u})$, a matriz Jacobiana de \mathbf{f} , possui apenas autovalores reais e distintos para todo $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$, pode-se decompor A da seguinte forma:

$$\mathbf{A} = \mathbf{R} \mathbf{D} \mathbf{R}^{-1} \quad \text{ou} \quad \mathbf{D} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{R} \quad (3.5)$$

onde \mathbf{D} é a matriz diagonal cujos elementos são os autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ de \mathbf{A} e as colunas $\mathbf{R}^{(i)}$ de \mathbf{R} são os autovetores à direita de \mathbf{A} , ou seja,

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \dots & \lambda_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R} = [\mathbf{R}^{(1)}, \mathbf{R}^{(2)}, \dots, \mathbf{R}^{(m)}], \quad \mathbf{A} \mathbf{R}^{(i)} = \lambda_i \mathbf{R}^{(i)} \quad (3.6)$$

A existência da matriz inversa \mathbf{R}^{-1} permite definir um novo conjunto de variáveis dependentes $\mathbf{V} = (v_1, v_2, \dots, v_m)^T$, chamadas variáveis características, dadas pela seguinte transformação:

$$\mathbf{V} = \{v_j\}_{j=1,2,\dots,m} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{u} \quad \text{ou} \quad \mathbf{u} = \mathbf{R}\mathbf{V} \quad (3.7)$$

Desta forma, empregando a relação (3.5) e fazendo $\mathbf{u} = \mathbf{R}\mathbf{V}$, teremos que:

$$\mathbf{R}\mathbf{V}_t + \mathbf{R}\mathbf{D}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{R}\mathbf{V}_x = \mathbf{R}\mathbf{V}_t + \mathbf{R}\mathbf{D}\mathbf{V}_x = \mathbf{R}(\mathbf{V}_t + \mathbf{D}\mathbf{V}_x) = 0 \Rightarrow \mathbf{V}_t + \mathbf{D}\mathbf{V}_x = 0 \quad (3.8)$$

Esta é a chamada forma canônica ou forma característica do sistema (3.3), que pode se escrita na seguinte forma matricial:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ v_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \lambda_1 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \dots & \lambda_m \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ v_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

Como \mathbf{D} é diagonal, o sistema (3.3) pode ser desacoplado em m equações escalares independentes, onde a i -ésima equação diferencial parcial do sistema é dada por:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial v_i}{\partial x} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (3.9)$$

Observa-se que o sistema desacoplado é idêntico à equação de advecção linear, cuja velocidade característica é λ_i e onde existem m curvas características

satisfazendo m equações diferenciais ordinárias $\frac{dx}{dt} = \lambda_i, \quad i = 1, 2, \dots, m$.

Assim, para determinar a solução do seguinte problema de valor inicial

$$\begin{cases} \mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x = 0 \\ \mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0(x) \end{cases} \quad (3.10)$$

Aplica-se a relação (3.5), chegando ao seguinte sistema equivalente a (3.10):

$$\begin{cases} \mathbf{v}_t + \mathbf{D}\mathbf{v}_x = 0 \\ \mathbf{v}(x, 0) = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{v}_0(x) \end{cases} \quad (3.11)$$

O sistema (3.11) é formado por m equações escalares,

$$\left(\mathbf{v}_p\right)_t + \lambda_p \left(\mathbf{v}_p\right)_x = 0, \quad p = 1, 2, \dots, m \quad (3.12)$$

cuja solução é dada por:

$$\mathbf{v}_p(x, t) = \mathbf{v}_p(x - \lambda_p t, 0) \quad (3.13)$$

Conseqüentemente, a solução do sistema original (3.10) é dada por:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(x, t) &= R\mathbf{v}(x, t) \\ &= \sum_{p=1}^m \mathbf{v}_p(x, t) \mathbf{R}_p \\ &= \sum_{p=1}^m \mathbf{v}_p(x - \lambda_p t, 0) \mathbf{R}_p \end{aligned} \quad (3.14)$$

As curvas $x = x_0 + \lambda_p t$ que satisfazem $x'(t) = \lambda_p$ são chamadas de curvas características da p -ésima família ou simplesmente p -características.

Cabem aqui duas observações importantes:

- i) A solução $\mathbf{u}(x, t)$ depende somente dos dados iniciais nos m pontos $x - \lambda_p t$. O coeficiente $\mathbf{v}_p(x, t)$, correspondente ao autovetor \mathbf{R}_p na expansão (3.14) de $\mathbf{u}(x, t)$ é constante ao longo de cada p -característica;
- ii) Considerando um ponto (x, t) com dado inicial suave em cada ponto $x_0 = x - \lambda_p t$, $p = 1, 2, \dots, m$, tem-se que $\mathbf{v}_p(x - \lambda_p t, 0) = \mathbf{R}_p^{-1} \mathbf{u}(x - \lambda_p t, 0)$ também será suave em cada um destes mesmos pontos e conseqüentemente $\mathbf{u}(x, t)$. Logo, uma singularidade no dado inicial pode propagar-se somente ao longo das características.

3.3. Sistemas Não Lineares de Leis de Conservação

Na seção anterior mostrou-se que no caso de sistemas hiperbólicos lineares de leis de conservação, dado um ponto (x,t) no plano $x-t$, a solução $\mathbf{u}(x,t)$ neste ponto depende somente do dado inicial nos m pontos $x_0^{(i)} = x - \lambda_i t$, que representam as interseções das características de velocidade λ_i com o eixo x . A solução para \mathbf{u} pode ser vista como uma superposição de m ondas, que se propagam sem que suas formas sofram qualquer deformação. Assim, a i -ésima onda tem forma $\mathbf{v}_i^0(x)R^i$ e se propaga com velocidade λ_i .

Considerando leis de conservação não lineares, a velocidade característica λ_i é função da própria solução \mathbf{u} , o que provoca distorções na forma de propagação das ondas. Neste contexto, questões referentes à existência, unicidade e estabilidade das soluções têm sido objeto de intensa pesquisa e estudo.

3.3.1. Solução Clássica e Características

Seja o problema escalar de valor inicial definido por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0 \quad (3.15)$$

com

$$u(x,0) = u_0(x) \quad (3.16)$$

Uma questão crucial para o problema de Cauchy, isto é, o problema de valor inicial para leis de conservação é que, em geral, devido à presença da não linearidade

no termo da derivada espacial, as soluções para este problema possuem uma solução clássica para um tempo suficientemente pequeno. Singularidades podem surgir por mais regulares que sejam os dados iniciais. Este fato significa dizer que, embora possam existir soluções generalizadas para todo o tempo, elas deixam de ser diferenciáveis a partir de um certo instante.

Para equações lineares, as singularidades na condição inicial são propagadas ao longo das características. No caso não linear isto não ocorre, uma vez que as singularidades (neste caso chamadas choques) são propagadas ao longo das curvas do espaço-tempo que não são necessariamente características.

Algumas vezes, ao invés da singularidade na condição inicial ser propagada ao longo das características, ela é suavizada instantaneamente, de modo que no instante imediatamente posterior, ou seja, para qualquer $t > 0$, a solução já é contínua. Este fenômeno não é devido exclusivamente à não linearidade da equação: na equação linear do calor (que não é hiperbólica), por exemplo, isto ocorre naturalmente, devido à propagação “instantânea” do calor, que suaviza quaisquer discontinuidades presentes na distribuição inicial de temperaturas em uma barra. No caso de equações de primeira ordem lineares, no entanto, este fenômeno não pode ocorrer, uma vez que quaisquer singularidades presentes na condição inicial são transmitidas através das curvas características (ao contrário do calor, a propagação é “ondulatória” e ondas se movem com velocidade finita).

Uma solução clássica do problema de Cauchy é uma função u de C^1 que satisfaz (3.15)-(3.16). Estas soluções são constantes ao longo das características, que são curvas $(x(t), t)$, definidas por:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f'(u) & , t > 0 \\ x(0) = x_0 \end{cases} \quad (3.17)$$

Além disto, as características são retas com inclinação igual a $f'(u_0(x_0))$.

Assim, $u(x(t), t) = u_0(x_0)$.

3.3.2. Solução Fraca

Se $\mathbf{u}(x, t)$ mede a densidade de uma certa substância em um intervalo I e \mathbf{f} descreve o fluxo de \mathbf{u} através da fronteira de I , a lei de conservação de massa afirma que a taxa de variação da quantidade total de substância contida em I deve ser igual ao fluxo que atravessa a fronteira, isto é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b \mathbf{u}(x, t) = \mathbf{f}(\mathbf{u}(a, t)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}(b, t)) \quad (3.18)$$

Supondo suficiente regularidade de \mathbf{u} e \mathbf{f} , a equação (3.18) é equivalente à forma diferencial (3.15). No entanto, (3.18) pode ser satisfeita por funções \mathbf{u} que não sejam diferenciáveis e até mesmo descontínuas. Portanto, exigir que \mathbf{u} seja C^1 (classe das funções continuamente diferenciáveis) é uma condição muito forte. Assim, para aumentar o conjunto que contemple tais soluções é preciso diminuir as restrições sobre a regularidade das mesmas. Tal procedimento dá origem às chamadas soluções fracas para (3.15)-(3.16).

Definição 3.1.: A função $\mathbf{u}_0 \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))^m$ é uma solução fraca de (3.15)-(3.16)

se,

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [\phi_t \cdot \mathbf{u} + \phi_x \cdot \mathbf{f}(\mathbf{u})] dx dt + \int_{-\infty}^\infty \phi(x, 0) \cdot \mathbf{u}(x, 0) dx = 0 \quad (3.19)$$

para toda função teste $\phi \in C_0^1(\mathbb{R} \times [0, \infty))^m$. Observa-se que ϕ é uma função vetorial.

Assim, escolhendo $\phi = (0, 0, \dots, 0, \phi_i, 0, 0, \dots, 0)$ com $\phi_i \in C_0^1(\mathbb{R})$ e $i = 1, \dots, m$, a equação (3.19) define uma solução fraca para a i -ésima componente do problema de Cauchy (3.15)-(3.16).

Conclui-se desta definição que uma solução clássica do problema de valor inicial é uma solução fraca, e que, se uma solução fraca é suave (regular), então ela é uma solução clássica.

3.3.3. Condições para Existência de Descontinuidade

As soluções fracas, em geral, são suaves, exceto em um número finito de conjuntos. No entanto, existe uma restrição que deve ser satisfeita pelas soluções fracas. Tal condição é chamada de condição de salto ou condição de Rankine-Hugoniot.

Supondo que a solução \mathbf{u} seja suave, exceto sobre a curva C parametrizada por $\{(x, t) : x = x(t)\}$, onde $x : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ é suave, com vetor normal

$\mathbf{n} = \left(1 + (x'(t))^2\right)^{-1/2} (1, -x'(t))$, então, a condição de choque de \mathbf{u} em C é dada por:

$$-[\mathbf{f}] + [\mathbf{u}] \frac{dx}{dt} = 0 \quad (3.20)$$

onde $[\mathbf{f}] = \mathbf{f}(\mathbf{u}_+) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_-)$, $[\mathbf{u}] = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$, \mathbf{u}_+ e \mathbf{u}_- são os valores de \mathbf{u} à esquerda e à direita de C , ou seja,

$$\begin{cases} s \equiv \frac{dx}{dt} = \frac{[\mathbf{f}]}{[\mathbf{u}]}, & t > 0 \\ x(0) = x_0 \end{cases} \quad (3.21)$$

Diz-se que $[\mathbf{u}]$ é o salto de \mathbf{u} através de C , $[\mathbf{f}]$ é o salto de $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ e s é a velocidade de C , isto é, a velocidade de propagação da descontinuidade.

Existem outros critérios de admissibilidade de choque. Uma revisão do tema pode ser encontrada no trabalho de Dafermos [24]. Neste trabalho será mencionado somente o critério clássico obtido por Lax [15]: um i -choque de velocidade s é admissível se $\lambda_i(\mathbf{u}_-) \geq s \geq \lambda_i(\mathbf{u}_+)$, onde λ_i são os autovalores da matriz Jacobiana $\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \mathbf{f}'(\mathbf{u})$ e $\mathbf{u}_{-/ +}$ são os estados respectivamente à esquerda e à direita do choque.

3.3.4. Existência e Unicidade de Soluções Fracas

Soluções fracas não são únicas e, para um mesmo dado inicial, pode ser possível obter-se mais de uma solução fraca para o problema (3.15)-(3.16). A condição de Rankine-Hugoniot não é suficiente para garantir a unicidade de tais soluções. É preciso, então, que outras condições sejam impostas, permitindo escolher entre todas as soluções fracas possíveis, aquela que seja fisicamente correta. Duas das mais importantes condições são a *condição de entropia* e o *critério de viscosidade*, discutidos a seguir.

3.3.4.1. Condição de Entropia

A condição de salto de Rankine-Hugoniot pode ser escrita como:

$$f(u_E) - f(u_D) = s(u_E - u_D) \quad (3.22)$$

onde $f(u)$ é uma função de fluxo arbitrária, s é a velocidade de propagação do choque e u_E e u_D são estados constantes à esquerda e à direita da descontinuidade.

No caso de problemas escalares, a condição de salto de Rankine-Hugoniot se reduz a:

$$s = \frac{f(u_E) - f(u_D)}{(u_E - u_D)} = \frac{\llbracket f \rrbracket}{\llbracket u \rrbracket} \quad (3.23)$$

Em algumas situações a solução fraca não é única, sendo requerida uma condição adicional que permita a escolha da solução fisicamente admissível, ou seja, aquela na qual a solução de viscosidade tende a desaparecer. A condição que define esta solução é que ela deve ser a solução limite da condição de viscosidade quando $\varepsilon \rightarrow 0$, em uma norma convenientemente escolhida. No caso de equações escalares as características do choque devem se interpenetrar à medida que o tempo avança.

Definição 3.2. Uma descontinuidade propagando-se com velocidade s dada pela equação (3.22) satisfaz a condição de entropia se:

$$f'(u_E) \geq s \geq f'(u_D) \quad (3.24)$$

sendo $f'(u)$ a velocidade característica. Se a função f for estritamente convexa, a velocidade s da condição de Rankine-Hugoniot deve estar situada entre $f'(u_E)$ e $f'(u_D)$, então, a equação (3.24) reduz-se simplesmente à exigência $f'(u_E) \geq f'(u_D)$, a qual, devido à convexidade, requer $u_E < u_D$.

Definição 3.3. Uma condição de entropia mais geral, devida à Oleinik [23], pode ser aplicada também a funções de fluxo escalares não convexas. A condição de entropia afirma que $u(x,t)$ é uma solução entrópica (que satisfaz a condição de entropia) se todas as descontinuidades obedecerem à condição:

$$\frac{f(u) - f(u_E)}{(u - u_E)} \geq s \geq \frac{f(u) - f(u_D)}{(u - u_D)} \quad \forall u_E < u < u_D \quad (3.25)$$

No caso da função de fluxo f ser convexa, a equação (3.25) reduz-se à equação (3.24).

Definição 3.4. Uma outra forma de condição de entropia é aquela baseada no espalhamento das características num leque de rarefação, LeVeque [36]. Se $u(x,t)$ for uma função crescente de x em alguma região, então as características se espalham se $f'' > 0$. A taxa de espalhamento pode ser quantificada, segundo Oleinik [23]. A condição de entropia afirma que $u(x,t)$ é uma solução que satisfaz a condição de entropia, se existir uma constante $E > 0$, tal que, para todo $a > 0$, $t > 0$ e $x \in \mathbb{R}$:

$$\frac{u(x+a,t) - u(x,t)}{a} < \frac{E}{t} \quad (3.26)$$

Para uma descontinuidade propagando-se entre estados constantes à esquerda e à direita u_E e u_D , a equação (3.26) será satisfeita se e somente se $u_D - u_E \leq 0$, o que leva à equação (3.24).

A condição (3.26) é mais facilmente aplicável ao estudo de métodos numéricos – que devem convergir para uma solução correta. Fazendo $a = \Delta x$, deve-se assegurar a existência de uma constante $E > 0$ tal que

$$u_{j+1}(t) - u_j(t) < \left(\frac{E}{t} \right) \Delta x \quad (3.27)$$

para todo $t > 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$. O trabalho de Oleinik [23] demonstra a existência de uma solução da equação de Burgers $\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(u) = 0$, sendo $f(u)$ uma função não linear de u , satisfazendo a condição de entropia (3.26). O procedimento para a demonstração é baseado na definição de uma aproximação discreta e na tomada de limites, como apresentado por Smoller [37].

Definição 3.5. Para sistemas hiperbólicos genuinamente não lineares de duas equações, as condições de entropia podem ser representadas por:

Para conexão por um choque-1:

$$s_1 < \lambda_{1_E}, \quad \lambda_{1_D} < s_1 < \lambda_{2_D} \quad (3.28)$$

Para conexão por um choque-2:

$$s_2 > \lambda_{2_D}, \quad \lambda_{1_E} < s_2 < \lambda_{2_E} \quad (3.29)$$

Definição 3.6. Seja um sistema hiperbólico genuinamente não linear de n equações:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} = 0 \quad (3.30)$$

cujos auto-valores $\lambda_1(\mathbf{u}) < \dots < \lambda_n(\mathbf{u})$ são reais e distintos e com auto-vetores correspondentes à esquerda (e_i) e à direita (d_i), sendo $i=1, \dots, n$. Supondo que a solução do sistema (3.30) tenha a seguinte forma:

$$\mathbf{u}(x, t) = \begin{cases} \mathbf{u}_E, & \text{se } x - st < 0 \\ \mathbf{u}_D, & \text{se } x - st > 0 \end{cases} \quad (3.31)$$

sendo s a velocidade da descontinuidade, então este sistema deve satisfazer a condição de salto [37], que pode ser representada por:

$$s(\mathbf{u}_E - \mathbf{u}_D) = \mathbf{f}(\mathbf{u}_E) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_D) \quad (3.32)$$

e, através de cada descontinuidade, as seguintes condições de entropia devem ser satisfeitas:

$$\begin{aligned} \lambda_1(\mathbf{u}_E) < \dots < \lambda_{k-1}(\mathbf{u}_E) < s < \lambda_k(\mathbf{u}_E) < \dots < \lambda_n(\mathbf{u}_E) \\ \lambda_1(\mathbf{u}_D) > \dots > \lambda_{k-1}(\mathbf{u}_D) > s > \lambda_k(\mathbf{u}_D) > \dots > \lambda_n(\mathbf{u}_D) \end{aligned} \quad (3.33)$$

3.3.4.2. Critério de Viscosidade

Um princípio bastante natural é que as soluções fisicamente e matematicamente corretas devam surgir como o limite das soluções do problema, ou seja, é preciso que a solução fraca correta seja o limite das soluções da equação de viscosidade associada, no limite, quando a viscosidade tender a zero. A definição do critério de viscosidade é feita a seguir [36].

Definição 3.7. Diz-se que \mathbf{u} é uma solução de viscosidade para a lei de conservação

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{f}(\mathbf{u})_x = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0 \quad (3.34)$$

se \mathbf{u} puder ser encontrada como o limite de soluções para a família de equações .

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{u}^\varepsilon) = \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathbf{u}^\varepsilon \quad \text{quando } \varepsilon \rightarrow 0 \quad (3.35)$$

onde ε é o coeficiente de viscosidade. Assim, é necessários que \mathbf{u} satisfaça a seguinte igualdade:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathbf{u}^\varepsilon = \mathbf{u} \quad (3.36)$$

Isto significa dizer que a solução que satisfaz a condição (3.35) deve originar um problema cuja solução existe, é única e continuamente dependente dos

dados iniciais (estável). Soluções que satisfazem a condição (3.35) são ditas soluções entrópicas.

A equação na forma

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} \quad (3.37)$$

onde μ é o coeficiente de viscosidade do fluido, é exatamente a lei de conservação para um fluido quando não se desprezam os efeitos dissipativos devidos à viscosidade.

Capítulo 4

O Problema de Riemann

4.1. Introdução

Muitos dos esquemas numéricos atualmente utilizados como, por exemplo, o método de Godunov [12], empregados na solução de sistemas hiperbólicos, são baseados na busca da solução, ou pelo menos de uma aproximação, de problemas de Riemann.

O problema de Riemann para sistemas homogêneos é um caso especial de problema de Cauchy, com dado inicial do tipo função degrau. No caso da equação escalar de advecção linear, o problema de Riemann é dado por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad t > 0, \quad -\infty < x < \infty \quad (4.1)$$

com condição inicial

$$u(x,0) = u_0(x) = \begin{cases} u_E, & \text{se } x < 0 \\ u_D, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (4.2)$$

onde u_E e u_D são valores (estados) constantes.

Neste caso, a solução do problema de Riemann (4.1)-(4.2) é dada por:

$$u(x,t) = u_0(x-at) = \begin{cases} u_E, & \text{se } x-at < 0 \\ u_D, & \text{se } x-at > 0 \end{cases}$$

A condição inicial tem uma descontinuidade em $x=0$ que se propaga para o interior do domínio $x > 0$ com uma velocidade a . Esta curva característica particular $x=at$ separa, no plano $x-t$, as curvas características à esquerda, nas quais a solução vale u_E daquelas curvas à direita, nas quais a solução vale u_D .

O problema de Riemann foi estudado por Peter Lax [15] na década de 50, sendo sua solução construída pela conexão dos estados à esquerda e à direita por curvas no plano de estados, no qual existe uma curva correspondente a cada tipo de onda elementar: onda de rarefação, onda de choque e descontinuidade de contato. O fato de haver mais de uma maneira de conectar u_E e u_D através de tais curvas leva à utilização de uma condição adicional – a condição de entropia de Lax, que impõe restrições a serem satisfeitas pelas soluções generalizadas.

4.2. O Problema de Riemann para Sistemas Lineares

No caso de sistemas lineares com coeficientes constantes, o problema de Riemann pode ser resolvido de forma explícita.

Considere o sistema estritamente hiperbólico como definido em (3.6), ou seja,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial (\mathbf{u})}{\partial x} = 0, \quad -\infty < x < \infty, \quad t > 0 \quad (4.3)$$

$$\text{com } \mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0(x) = \begin{cases} \mathbf{u}_E, & \text{se } x < 0 \\ \mathbf{u}_D, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

onde os autovalores de \mathbf{A} , supostos reais e distintos, são tais que $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_m$. A estrutura da solução do problema de Riemann (4.3)-(4.4) consiste de m ondas que surgem da origem, cada uma com um autovalor λ_i , ou seja, cada uma destas ondas provoca um salto de descontinuidade em \mathbf{u} que se propaga com velocidade λ_i .

A solução geral é obtida a partir de (3.18), isto é,

$$\mathbf{u}(x, t) = \sum_{p=1}^m \mathbf{v}_p(x - \lambda_p t, 0) \mathbf{r}_p \quad (4.5)$$

Pode-se, então, expandir os estados constantes \mathbf{u}_E e \mathbf{u}_D , como uma combinação linear do conjunto $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_m$, da seguinte forma:

$$\mathbf{u}_E = \sum_{p=1}^m \alpha_p \mathbf{r}_p \quad \mathbf{u}_D = \sum_{p=1}^m \beta_p \mathbf{r}_p \quad (4.6)$$

Logo, cada uma das expansões em (4.6) pode ser vista como um caso especial de (4.5), de modo que:

$$\mathbf{v}_p(x, 0) = \begin{cases} \alpha_p, & \text{se } x < 0 \\ \beta_p, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

Então, a solução geral em termos das variáveis características será dada por:

$$\mathbf{v}_p(x, 0) = \begin{cases} \alpha_p, & \text{se } x - \lambda_p t < 0 \\ \beta_p, & \text{se } x - \lambda_p t > 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

Para um dado ponto (x, t) existe um autovalor λ_p , tal que $\lambda_p < x/t < \lambda_{p+1}$, ou seja, $x - \lambda_p t > 0 \quad \forall p$ tal que $p \leq P$. Pode-se escrever a solução do problema de Riemann (4.3)-(4.4) em termos das variáveis originais como:

$$\mathbf{u}(x,t) = \sum_{p=P(x,t)+1}^m \alpha_p \mathbf{r}_p + \sum_{p=1}^{P(x,t)} \beta_p \mathbf{r}_p \quad (4.9)$$

onde o inteiro $P = P(x,t)$ é o valor máximo de p para o qual $x - \lambda_p t > 0$.

Quando $\mathbf{u}(x,t)$ atravessa a p -ésima característica, o valor de $x - \lambda_p t$ passa pelo zero e o correspondente \mathbf{v}_p salta de α_p para β_p e os outros coeficientes \mathbf{v}_i ($i \neq p$) permanecem constantes. O salto é caracterizado por $[[\mathbf{u}]] = (\beta_p - \alpha_p) \mathbf{r}_p$.

Como $\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{A}\mathbf{u}$, observa-se que este salto satisfaz a condição de Rankine-Hugoniot uma vez que: $[[\mathbf{f}]] = \mathbf{A}[[\mathbf{u}]] = (\beta_p - \alpha_p) \mathbf{r}_p = \lambda_p [[\mathbf{u}]]$, onde λ_p é a velocidade de propagação deste salto.

Alternativamente, pode-se escrever a solução $\mathbf{u}(x,t)$ de (4.9) em termos destes saltos como:

$$\mathbf{u}(x,t) = \mathbf{u}_E + \sum_{p|\lambda_p < x/t} (\beta_p - \alpha_p) \mathbf{r}_p \quad (4.10)$$

$$= \mathbf{u}_D - \sum_{p|\lambda_p > x/t} (\beta_p - \alpha_p) \mathbf{r}_p \quad (4.11)$$

Desta forma, a tarefa de encontrar a solução do problema de Riemann linear consiste em determinar um modo de escrever o salto $\mathbf{u}_D - \mathbf{u}_E$ como uma composição de saltos, tais que:

$$\mathbf{u}_D - \mathbf{u}_E = (\beta_1 - \alpha_1) \mathbf{r}_1 + \dots + (\beta_m - \alpha_m) \mathbf{r}_m = \sum_{i=1}^m (\beta_i - \alpha_i) \mathbf{r}_i \quad (4.12)$$

onde cada salto se propaga com uma velocidade λ_i satisfazendo a condição de Rankine-Hugoniot.

4.3. O Problema de Riemann para Sistemas Não Lineares

No Capítulo 3 verificou-se que, como no caso escalar, as soluções de sistemas de leis de conservação também podem desenvolver singularidades num tempo finito. Desta forma, deve-se considerar a solução em um sentido fraco, cuja definição é dada a seguir.

Definição 4.1 Seja $\mathbf{u}_0 \in L^1_{loc}(\mathbb{R}, \mathbb{R}^m) \cap L^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R}^m)$. Diz-se que \mathbf{u} é uma solução de

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} = 0, & x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ \mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0(x) \end{cases} \quad (4.13)$$

se,

$$\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^+} [\mathbf{u}(x, t) \phi_t(x, t) + \mathbf{f}(\mathbf{u}(x, t)) \phi_x(x, t)] dt dx + \int_{\mathbb{R}} [\phi(x, 0) \mathbf{u}_0(x)] dx = 0 \quad (4.14)$$

onde $\phi(x, t) \in C_0^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))$.

No Capítulo 3, verificou-se que as descontinuidades que podem ser assumidas por uma solução da forma da equação (4.13) devem satisfazer a condição de Rankine-Hugoniot. Logo, cada uma das m leis de conservação deve satisfazer uma relação do tipo:

$$s \llbracket \mathbf{u}_p \rrbracket = \llbracket \mathbf{f}_p \rrbracket, \quad p = 1, 2, \dots, m \quad (4.15)$$

para cada curva de descontinuidade $t \mapsto (x(t), t)$, onde $s = x'(t)$ é a velocidade da descontinuidade.

4.3.1. Campos Característicos

Seja um sistema hiperbólico de leis de conservação na forma (3.19) com autovalores reais $\lambda_k(\mathbf{u})$ da matriz Jacobiana $\mathbf{A}(\mathbf{u})$, $\mathbf{u} \in D \subset \mathbb{R}^m$ e correspondentes autovetores à direita $\mathbf{r}_k(\mathbf{u})$. A velocidade característica $\lambda_k(\mathbf{u})$ define um campo característico. No caso de uma equação hiperbólica não linear as velocidades características dependem da solução \mathbf{u} e, neste caso, podem ocorrer duas situações.

No primeiro caso, a velocidade da onda varia ao longo de uma onda elementar. Assim, ao longo de uma onda de rarefação, a velocidade da onda cresce da esquerda para a direita. De forma semelhante, ao longo de uma onda de choque a velocidade da onda decresce da esquerda para a direita. Nestes casos, o sistema é genuinamente não linear. No plano $x-t$ as características convergem (choque) ou divergem (leque de rarefação).

Na segunda situação, a velocidade da onda pode ser constante ao longo de uma onda elementar e, neste caso, tem-se uma descontinuidade de contato. Nesta situação, a equação hiperbólica é linearmente degenerada, uma vez que ela se comporta (localmente) como um sistema hiperbólico linear. A figura 4.1 mostra o comportamento das características ao longo de ondas elementares.

Definição 4.2: Um campo característico $\lambda_k(\mathbf{u})$ é denominado *genuinamente não linear*, se

$$\nabla \lambda_k(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{r}_k(\mathbf{u}) \neq 0 \quad \forall \mathbf{u} \in D \subset \mathbb{R}^m \quad (4.16)$$

Definição 4.3. Um campo característico $\lambda_k(\mathbf{u})$ é denominado *linearmente degenerado*, se

$$\nabla \lambda_k(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{r}_k(\mathbf{u}) = 0 \quad \forall \mathbf{u} \in D \subset \mathbb{R}^m \quad (4.17)$$

onde $\nabla \lambda_k(\mathbf{u}) = \left(\frac{\partial}{\partial u_1} \lambda_k, \frac{\partial}{\partial u_2} \lambda_k, \dots, \frac{\partial}{\partial u_m} \lambda_k \right)^T$ e $\nabla \lambda_k(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{r}_k = \sum_{j=1}^m \frac{\partial \lambda_k}{\partial u_j} r_j^{(k)}$.

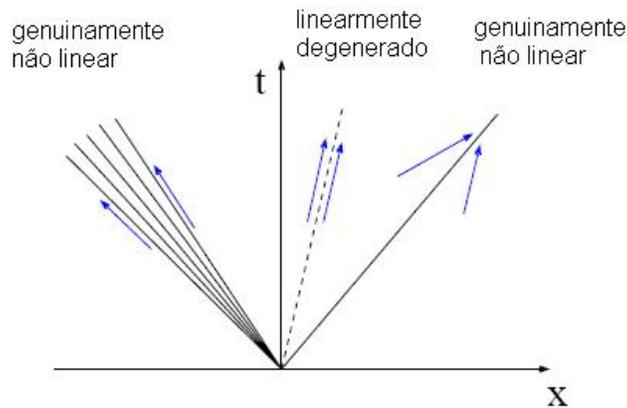


Figura 4.1 – Ilustração dos comportamentos: genuinamente não linear e linearmente degenerado.

No caso de sistemas lineares, os autovalores são constantes e $\nabla \lambda_k(\mathbf{u}) = 0$, ou seja, todos os campos característicos de um sistema hiperbólico linear com coeficientes constantes são linearmente degenerados.

Suponha que \mathbf{u} seja uma solução suave de um sistema hiperbólico cujos autovalores de $\mathbf{f}'(\mathbf{u})$ são tais que $\lambda_1(\mathbf{u}) \leq \lambda_2(\mathbf{u}) \leq \dots \leq \lambda_m(\mathbf{u})$. Se $x(t) \in C^1([0, \tau])$ for uma solução de $x'(t) = \lambda_k(\mathbf{u})$, então a curva $\{(x(t), t) : 0 \leq t \leq \tau\}$ é chamada k -característica.

Supõe-se que os estados à esquerda e à direita estejam próximos, no sentido que a diferença $\mathbf{u}_E - \mathbf{u}_D$ seja pequena. Desta forma, os estados constantes $\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$ estão separados por pequenos saltos. A k -ésima descontinuidade deve satisfazer a condição de salto de Rankine-Hugoniot, isto é,

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}_{k-1}) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_k) = s(\mathbf{u}_{k-1} - \mathbf{u}_k) \quad (4.18)$$

onde s é a velocidade de propagação. Deseja-se encontrar $(\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_{k-1})$ e s para cada k .

Inicialmente, constrói-se uma solução fraca do problema de Riemann que consiste em m descontinuidades que se propagam com velocidades $s_1 < s_2 < \dots < s_m$, lembrando que uma descontinuidade que se propague com velocidade s e possua valores constantes \mathbf{u}_E e \mathbf{u}_D em cada lado da descontinuidade deve satisfazer a condição de Rankine-Hugoniot. Supondo que o ponto $\mathbf{u}_E \in \mathbb{R}^m$ esteja fixo, determina-se o conjunto de pontos \mathbf{u}_D que podem ser conectados a \mathbf{u}_E por uma descontinuidade que satisfaça tal condição.

A condição de Rankine-Hugoniot estabelece que:

$$\mathbf{f}((\mathbf{u}_D)_k(\xi)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_E) = s_k(\xi)((\mathbf{u}_D)_k(\xi) - \mathbf{u}_E), \quad k = 1, 2, \dots, m \quad (4.19)$$

onde $(\mathbf{u}_D)_k(\xi)$ é uma parametrização da k -ésima curva que passa por \mathbf{u}_E e que satisfaz $(\mathbf{u}_D)_k(0) = \mathbf{u}_E$, sendo ξ é o parâmetro.

Diferenciando a igualdade (4.19) com respeito a ξ e substituindo por $\xi = 0$, tem-se:

$$\mathbf{f}'(\mathbf{u}_E)(\mathbf{u}_D)_k'(0) = s_k(0)(\mathbf{u}_D)_k'(0) \quad (4.20)$$

Isto significa que $(\mathbf{u}_D)_k'(0)$ deve ser um múltiplo escalar do autovetor $r_k(\mathbf{u}_E)$ de $\mathbf{f}'(\mathbf{u}_E)$, enquanto $s_k(0)$ deve ser o autovalor $\lambda_k(\mathbf{u}_E)$. Conclui-se, portanto, que a curva $(\mathbf{u}_D)_k(\xi)$ deve ser tangente a $r_k(\mathbf{u}_E)$ no ponto \mathbf{u}_E .

Como visto no Capítulo 3, a solução do problema de Riemann pode não ser única. Em geral são requeridas condições iniciais para o problema. Para uma única lei de conservação, no caso em que f é estritamente convexa, esta condição se dá pela seguinte desigualdade:

$$f'(u_E) > s > f'(u_D) \quad (4.21)$$

Para o caso de sistemas de leis de conservação, esta condição aplicada a um campo genuinamente não linear permite afirmar que o salto no k -ésimo campo (de \mathbf{u}_E a \mathbf{u}_D , por exemplo) é admissível se,

$$\lambda_k(\mathbf{u}_E) > s > \lambda_k(\mathbf{u}_D) \quad (4.22)$$

Cada uma das leis de conservação deve satisfazer a equação

$$s[[\mathbf{u}_k]] = [[\mathbf{f}_k]], \quad k = 1, 2, \dots, m \quad (4.23)$$

Uma descontinuidade que satisfaz (4.15) e (4.22) é denominada k -choque. Para sistemas com k -características que sejam genuinamente não lineares ou linearmente degenerados a condição de entropia (4.22) é modificada para:

$$\lambda_k(\mathbf{u}_E) \geq s \geq \lambda_k(\mathbf{u}_D) \quad (4.24)$$

Uma outra classe importante de soluções são as chamadas ondas de rarefação. Neste caso, a solução do sistema é constante ao longo da curva $x = \xi t$ e, conseqüentemente, a solução é uma função de x/t , isto é,

$$\mathbf{u}(x, t) = \begin{cases} \mathbf{u}_E, & \text{se } x \leq \xi_1 t \\ \mathbf{w}(x/t), & \text{se } \xi_1 t \leq x \leq \xi_2 t \\ \mathbf{u}_D, & \text{se } x \geq \xi_2 t \end{cases} \quad (4.25)$$

Para determinar as ondas de rarefação, calculam-se os k -invariantes de Riemann, ou seja, encontra-se uma função v_k que seja constante sobre as curvas de rarefação $\mathbf{w}(\xi)$ do k -ésimo campo, isto é,

$$v_k(\mathbf{w}(\xi)) = \text{constante} \quad (4.26)$$

Derivando em relação a ξ tem-se:

$$\nabla v_k \cdot \mathbf{w}'(\xi) = 0 \quad (4.27)$$

O que implica em $\nabla v_k \cdot \mathbf{r}_k = 0$. Logo, pode-se determinar as ondas de rarefação v_k que satisfaçam esta condição.

4.4. Solução Generalizada do Problema de Riemann

Nesta seção, a solução do problema de Riemann é descrita empregando os conceitos de invariantes de Riemann, choques, rarefações, soluções fracas e condição de entropia, vistos anteriormente.

Considera-se o seguinte problema de valor inicial

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\phi v) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\phi v) + \frac{\partial}{\partial x}(\phi v^2 + p) &= 0 \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\text{com } (\phi, v) = \begin{cases} (\phi_E, v_E), & \text{para } t = 0, x < 0 \\ (\phi_D, v_D), & \text{para } t = 0, x > 0 \end{cases}$$

onde ϕ_E, ϕ_D, v_E, v_D são valores constantes e $p = \hat{p}(\phi)$ é uma função convexa com derivada estritamente positiva.

Uma característica importante do problema de Riemann é ser invariante a transformações de auto-similaridade, isto é, $(x, t) \mapsto (\beta x, \beta t), \beta > 0$.

Seja $\xi = x/t$, uma variável de similaridade. A solução do problema (4.28), no sentido generalizado, depende apenas da razão x/t .

Assim, um problema que depende de um conjunto de variáveis (ϕ, v) pode ser convertido num problema dependente de uma variável $\xi = x/t$, desde que duas condições necessárias e suficientes sejam satisfeitas. A primeira condição para dependência em ξ requer valores constantes para a função tanto à esquerda quanto à direita. Esta condição fica automaticamente satisfeita ao se considerar uma função degrau para condição inicial, como, por exemplo

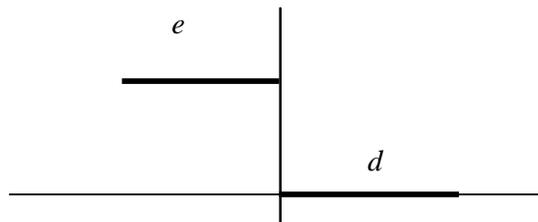


Figura 4.2 – Função degrau.

permitindo, assim, recuperar os valores constantes à esquerda e à direita dos dados iniciais quando a característica tender a ∞ :

$$\begin{aligned} (\phi, v) &= (\phi_E, v_E) && \text{para } \xi = x/t \rightarrow -\infty \\ (\phi, v) &= (\phi_D, v_D) && \text{para } \xi = x/t \rightarrow +\infty \end{aligned} \quad (4.29)$$

A segunda condição a ser satisfeita é que o problema seja homogêneo, de forma a garantir que ele permaneça homogêneo quanto à dependência nas variáveis x e t e a equação,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} &= 0 \\ \text{com } \mathbf{u}(x, 0) &= \begin{cases} \mathbf{u}_E, & \text{se } x < 0 \\ \mathbf{u}_D, & \text{se } x > 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.30)$$

possa ser convertida numa equação com dependência na variável de similaridade ξ .

Na equação acima, $\mathbf{A}(\mathbf{u})$ representa a matriz definida na seção 3.1.

A solução geral do problema (4.28) pode ser escrita na seguinte forma matricial:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{x}{t^2} \right) \frac{d}{d\xi} \begin{bmatrix} \phi \\ \phi v \end{bmatrix} + \left(\frac{1}{t} \right) \frac{d}{d\xi} \begin{bmatrix} \phi v \\ \phi v^2 + p \end{bmatrix} &= 0, \quad \xi = \frac{x}{t} \\ \text{com } \begin{cases} (\phi, v) = (\phi_E, v_E), & \text{para } \xi \rightarrow -\infty \\ (\phi, v) = (\phi_D, v_D), & \text{para } \xi \rightarrow \infty \end{cases} \end{aligned} \quad (4.31)$$

ou na forma alternativa,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} -\frac{x}{t} & 1 \\ p' - v^2 & -\frac{x}{t} + 2v \end{bmatrix} \frac{d}{d\xi} \begin{bmatrix} \phi \\ \phi v \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \text{com } \begin{cases} (\phi, v) = (\phi_E, v_E), & \text{para } \xi \rightarrow -\infty \\ (\phi, v) = (\phi_D, v_D), & \text{para } \xi \rightarrow \infty \end{cases} \end{aligned} \quad (4.32)$$

onde p' representa a primeira derivada de p com respeito a ϕ , sempre positiva.

Com base nas equações acima, verifica-se que x/t corresponde exatamente aos autovalores da matriz $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ p' - v^2 & 2v \end{bmatrix}$, desde que as incógnitas ϕ e v sejam

suaves. Além disto, a suavidade de ϕ e v , para $\xi \in (\xi_1, \xi_2)$ é garantida somente quando os autovalores puderem ser igualados a x/t ao longo deste intervalo.

Os autovalores do sistema (4.28) são, em ordem crescente, dados por:

$$\lambda_1 = \hat{\lambda}_1(\phi, v) = v - \sqrt{p'} \quad e \quad \lambda_2 = \hat{\lambda}_2(\phi, v) = v + \sqrt{p'} \quad (4.33)$$

nas regiões do plano $x-t$ onde ϕ e v não são constantes, o problema (4.32) é verificado se a seguinte equação for satisfeita:

$$-\lambda_1 d\phi + d(\phi v) = 0 \Rightarrow -(v \pm \sqrt{p'}) d\phi + d(\phi v) = 0 \quad (4.34)$$

em outras palavras,

$$\begin{aligned} -\lambda_1 d\phi + d(\phi v) = 0 & \quad \text{quando} \quad \lambda_1 = v - \sqrt{p'} = x/t \\ -\lambda_2 d\phi + d(\phi v) = 0 & \quad \text{quando} \quad \lambda_2 = v + \sqrt{p'} = x/t \end{aligned} \quad (4.35)$$

Os invariantes de Riemann \mathfrak{R}_1 e \mathfrak{R}_2 , associados a λ_1 e λ_2 são obtidos das equações diferenciais acima, sendo dados por:

$$\mathfrak{R}_1 = \text{constante} = \int \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi + v \quad e \quad \mathfrak{R}_2 = \text{constante} = -\int \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi + v \quad (4.36)$$

Assim, os invariantes de Riemann podem ser expressos por:

$$\mathfrak{R}_1 = \lambda_1 + \Theta(\phi) \quad e \quad \mathfrak{R}_2 = \lambda_2 - \Theta(\phi) \quad (4.37)$$

onde

$$\Theta(\phi) = \frac{d}{d\phi} \left[\phi \int \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \right] \quad (4.38)$$

Logo, os estados à esquerda (ϕ_E, v_E) e à direita (ϕ_D, v_D) serão conectados por rarefação-1 se, entre eles, Θ for uma função decrescente de x/t . Por outro lado, o estado à direita (ϕ_D, v_D) e o estado (ϕ_*, v_*) estarão conectados por uma rarefação-2 se, entre eles, Θ for uma função crescente de x/t .

O estado à esquerda (ϕ_E, v_E) será conectado ao estado intermediário (ϕ_*, v_*) por uma rarefação-1 se, e somente se, entre estes dois estados, o primeiro autovalor for uma função crescente de x/t . Por outro lado, estes dois estados serão conectados por choque-1 se, e somente se, as condições de salto e as condições de entropia para estes dois estados forem satisfeitas.

O estado à direita (ϕ_D, v_D) será conectado ao estado intermediário (ϕ_*, v_*) por rarefação-2 se, e somente se, entre estes dois estados o segundo autovalor for uma função crescente de x/t . Por outro lado, estes dois estados serão conectados por choque-2 se, e somente se, as condições de salto e de entropia para eles forem satisfeitas.

Como p é uma função convexa de ϕ , tem-se que $\Theta(\phi)$ é uma função crescente de ϕ . Assim, λ_1 será uma função crescente de x/t se, e somente se, $\phi_E > \phi_*$, o que significa dizer que (ϕ_E, v_E) e (ϕ_*, v_*) estarão conectados por rarefação-1. De forma análoga, os estados (ϕ_*, v_*) e (ϕ_D, v_D) serão conectados por rarefação-2 se, e somente se, $\phi_D > \phi_*$.

Dois estados estarão conectados por um choque se a condição de salto de Rankine-Hugoniot, dada por:

$$\frac{[[\phi v]]}{\phi} = \frac{[[\phi v^2 + \bar{p}]]}{[[\phi v]]} = s \quad (4.39)$$

Onde, como anteriormente visto, " $[[\]]$ " denota o salto e s a velocidade do choque (descontinuidade) forem satisfeitas, bem como as condições de entropia.

Os estados (ϕ_E, v_E) e (ϕ_*, v_*) serão conectados por choque-1 se satisfizerem as condições de salto e,

$$s_1 < \hat{\lambda}_1(\phi_E, v_E) \quad e \quad \hat{\lambda}_1(\phi_*, v_*) < s_1 < \hat{\lambda}_2(\phi_*, v_*) \quad (4.40)$$

Os estados (ϕ_*, v_*) e (ϕ_D, v_D) serão conectados por choque-2 se satisfizerem as condições de salto e,

$$s_2 > \hat{\lambda}_2(\phi_D, v_D) \text{ e } \hat{\lambda}_2(\phi_*, v_*) > s_2 > \hat{\lambda}_1(\phi_*, v_*) \quad (4.41)$$

A convexidade de p garante as condições de entropia. Os resultados anteriores podem ser resumidos na seguinte tabela, onde as quatro soluções possíveis são consideradas.

Tabela 4.1 – Soluções Possíveis do Problema de Riemann.

Condições em ϕ	Conexões entre os estados	Condições em v
$\phi_E > \phi_* < \phi_D$	rarefação-1/rarefação-2	$v_E < v_* < v_D$
$\phi_E < \phi_* > \phi_D$	choque-1/choque-2	$v_E > v_* > v_D$
$\phi_E > \phi_* > \phi_D$	rarefação-1/choque-2	$v_E < v_* > v_D$
$\phi_E < \phi_* < \phi_D$	choque-1/rarefação-2	$v_E > v_* < v_D$

Se os estados (ϕ_E, v_E) e (ϕ_*, v_*) são conectados por rarefação-1 enquanto que os estados (ϕ_*, v_*) e (ϕ_D, v_D) forem conectados por rarefação-2, então ϕ_* e v_* são determinados de forma única por:

$$v_E = v_* + \int_{\phi_E}^{\phi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \quad \text{e} \quad v_* = v_D - \int_{\phi_*}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \quad (4.42)$$

As equações acima são equivalentes a:

$$\int_{\phi_E}^{\phi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi = \frac{1}{2} \left[v_E - v_D + \int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \right] \quad (4.43)$$

ou

$$\int_{\phi_*}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi = \frac{1}{2} \left[v_D - v_E + \int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \right]$$

Como no caso de ocorrer rarefação-1/rarefação-2, $\phi_E > \phi_* < \phi_D$, então:

$$\int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi > \frac{1}{2} \left[v_E - v_D + \int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \right] \quad (4.44)$$

$$\int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi < \frac{1}{2} \left[v_D - v_E + \int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \right]$$

Desta forma, a ocorrência de rarefação-1/rarefação-2 é garantida pela seguinte desigualdade:

$$\left| \int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \right| < v_D - v_E \quad (4.45)$$

Se os estados (ϕ_E, v_E) e (ϕ_*, v_*) são conectados por choque-1 enquanto que (ϕ_*, v_*) e (ϕ_D, v_D) são conectados por choque-2, então as condições de salto passam a ser dadas por:

$$\frac{\phi_* v_* - \phi_E v_E}{\phi_* - \phi_E} = \frac{\phi_* v_*^2 - \phi_E v_E^2 + p_* - p_E}{\phi_* v_* - \phi_E v_E} = s_1 \quad (4.46)$$

$$\frac{\phi_D v_D - \phi_* v_*}{\phi_D - \phi_*} = \frac{\phi_D v_D^2 - \phi_* v_*^2 + p_D - p_*}{\phi_D v_D - \phi_* v_*} = s_2$$

onde s_1 é a velocidade de propagação do choque-1 e s_2 a velocidade de propagação do choque-2. Na condição de salto (4.43), tem-se que $p_\square = \hat{p}(\phi_\square)$. A partir das equações acima e das condições de entropia, tem-se:

$$v_* = v_E - (\phi_* - \phi_E) \sqrt{\left(\frac{p_* - p_E}{\phi_* - \phi_E} \right) \frac{1}{\phi_* \phi_E}} \quad (4.47)$$

$$v_* = v_D - (\phi_D - \phi_*) \sqrt{\left(\frac{p_D - p_*}{\phi_D - \phi_*} \right) \frac{1}{\phi_D \phi_*}}$$

Assim, ϕ_* é a única raiz de

$$v_D - (\phi_D - \phi_*) \sqrt{\left(\frac{p_D - p_*}{\phi_D - \phi_*}\right) \frac{1}{\phi_D \phi_*}} = v_E - (\phi_* - \phi_E) \sqrt{\left(\frac{p_* - p_E}{\phi_* - \phi_E}\right) \frac{1}{\phi_* \phi_E}} \quad (4.48)$$

ou, em forma equivalente,

$$\begin{aligned} \sqrt{\left(\frac{p_D - p_*}{\phi_D - \phi_*}\right) \frac{\phi_*}{\phi_D}} + \sqrt{\left(\frac{p_* - p_E}{\phi_* - \phi_E}\right) \frac{\phi_*}{\phi_E}} = \\ v_E - v_D + \sqrt{\left(\frac{p_* - p_E}{\phi_* - \phi_E}\right) \frac{\phi_E}{\phi_*}} + \sqrt{\left(\frac{p_D - p_*}{\phi_D - \phi_*}\right) \frac{\phi_D}{\phi_*}} \end{aligned} \quad (4.49)$$

ou ainda,

$$\sqrt{\left(\frac{p_D - p_*}{\phi_D - \phi_*}\right)} \left(\sqrt{\frac{\phi_*}{\phi_D}} - \sqrt{\frac{\phi_D}{\phi_*}} \right) + \sqrt{\left(\frac{p_* - p_E}{\phi_* - \phi_E}\right)} \left(\sqrt{\frac{\phi_*}{\phi_E}} - \sqrt{\frac{\phi_E}{\phi_*}} \right) = v_E - v_D \quad (4.50)$$

Como $\phi_E < \phi_* > \phi_D$ e p é convexa, conclui-se que a solução será dada por choque-1/choque-2 se e somente se,

$$\sqrt{(p_D - p_E) \left(\frac{1}{\phi_E} - \frac{1}{\phi_D} \right)} = \sqrt{\left(\frac{p_D - p_E}{\phi_D - \phi_E}\right)} \left| \sqrt{\frac{\phi_D}{\phi_E}} - \sqrt{\frac{\phi_E}{\phi_D}} \right| < v_E - v_D \quad (4.51)$$

Se os estados (ϕ_E, v_E) e (ϕ_*, v_*) são conectados por rarefação-1 enquanto os estados (ϕ_*, v_*) e (ϕ_D, v_D) são conectados por choque-2, então $\phi_E > \phi_* > \phi_D$ e o estado intermediário (ϕ_*, v_*) será obtido por:

$$v_E = v_* + \int_{\phi_E}^{\phi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \quad (4.52)$$

$$v_* = v_D - (\phi_D - \phi_*) \sqrt{\left(\frac{p_D - p_*}{\phi_D - \phi_*}\right) \frac{1}{\phi_D \phi_*}}$$

Logo, ϕ_* é a única raiz de

$$v_E - v_D = -(\phi_D - \phi_*) \sqrt{\left(\frac{p_D - p_*}{\phi_D - \phi_*}\right) \frac{1}{\phi_D \phi_*}} + \int_{\phi_E}^{\phi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \quad (4.53)$$

Uma condição suficiente para a solução rarefação-1/choque-2 é dada pela seguinte expressão:

$$(\phi_E - \phi_D) \sqrt{\left(\frac{p_D - p_E}{\phi_D - \phi_E}\right) \frac{1}{\phi_D \phi_E}} > v_E - v_D > \int_{\phi_e}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi; \quad (4.54)$$

com $\phi_E > \phi_* > \phi_D$

Se os estados (ϕ_E, v_E) e (ϕ_*, v_*) são estão conectados por choque-1 enquanto os estados (ϕ_*, v_*) e (ϕ_D, v_D) estão conectados por rarefação-2, então $\phi_E < \phi_* < \phi_D$ e o estado intermediário (ϕ_*, v_*) será obtido a partir de:

$$v_* = v_E - (\phi_* - \phi_E) \sqrt{\left(\frac{p_* - p_E}{\phi_* - \phi_E}\right) \frac{1}{\phi_* \phi_E}} \quad (4.55)$$

$$v_* = v_D - \int_{\phi_*}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi$$

Assim, ϕ_* é a única raiz de

$$v_D - v_E = \int_{\phi_*}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi - (\phi_* - \phi_E) \sqrt{\left(\frac{p_* - p_E}{\phi_* - \phi_E}\right) \frac{1}{\phi_* \phi_E}} \quad (4.56)$$

Uma condição suficiente para a solução choque-1/rarefação-2 é dada pela seguinte expressão:

$$(\phi_D - \phi_E) \sqrt{\left(\frac{p_* - p_E}{\phi_* - \phi_E}\right) \frac{1}{\phi_* \phi_E}} > v_E - v_D > - \int_{\phi_e}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p}}{\phi} d\phi \quad (4.57)$$

A Tabela 4.2 resume todas as soluções que podem ser determinadas *a priori* para o problema de Riemann discutido neste capítulo.

Tabela 4.2 – Escolhas *a priori* de Possíveis Soluções
do Problema de Riemann.

Condições	Soluções
$-\left \int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi \right > v_E - v_D$	rarefação-1/rarefação-2
$\sqrt{(p_D - p_E) \left(\frac{1}{\phi_E} - \frac{1}{\phi_D} \right)} < v_E - v_D$	choque-1/choque-2
$(\phi_E - \phi_D) \sqrt{\left(\frac{p_D - p_E}{\phi_D - \phi_E} \right) \frac{1}{\phi_D \phi_E}} > v_E - v_D > \int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi$	rarefação-1/choque-2
$(\phi_D - \phi_E) \sqrt{\left(\frac{p_D - p_E}{\phi_D - \phi_E} \right) \frac{1}{\phi_D \phi_E}} > v_E - v_D > -\int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi$	choque-1/rarefação-2
$v_E - v_D = \int_{\phi_E}^{\phi_D} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi$	rarefação-1
$v_E - v_D = \int_{\phi_D}^{\phi_E} \frac{\sqrt{p'}}{\phi} d\phi$	rarefação-2
$(\phi_D - \phi_E) \sqrt{\left(\frac{p_D - p_E}{\phi_D - \phi_E} \right) \frac{1}{\phi_D \phi_E}} = v_E - v_D$	choque-1
$(\phi_E - \phi_D) \sqrt{\left(\frac{p_D - p_E}{\phi_D - \phi_E} \right) \frac{1}{\phi_D \phi_E}} = v_E - v_D$	choque-2

Uma vez conhecidos os estados intermediários (ϕ_*, v_*) , a solução (ϕ, v) é dada

por:

i) rarefação-1/rarefação-2:

$$(\phi, v) = \begin{cases} (\phi_E, v_E) & \text{se } -\infty < x/t < \hat{\lambda}_1(\phi_E, v_E) \\ (f_1, g_1) & \text{se } \hat{\lambda}_1(\phi_E, v_E) \leq x/t < \hat{\lambda}_1(\phi_*, v_*) \\ (\phi_*, v_*) & \text{se } \hat{\lambda}_1(\phi_*, v_*) < x/t < \hat{\lambda}_2(\phi_*, v_*) \\ (f_2, g_2) & \text{se } \hat{\lambda}_2(\phi_*, v_*) \leq x/t < \hat{\lambda}_2(\phi_D, v_D) \\ (\phi_D, v_D) & \text{se } \hat{\lambda}_2(\phi_D, v_D) < x/t < \infty \end{cases} \quad (4.58)$$

ii) choque-1/choque-2:

$$(\phi, v) = \begin{cases} (\phi_E, v_E) & \text{se } -\infty < x/t < s_1 \\ (\phi_*, v_*) & \text{se } s_1 < x/t < s_2 \\ (\phi_D, v_D) & \text{se } s_2 < x/t < \infty \end{cases} \quad (4.59)$$

iii) rarefação-1/choque-2:

$$(\phi, v) = \begin{cases} (\phi_E, v_E) & \text{se } -\infty < x/t < \hat{\lambda}_1(\phi_E, v_E) \\ (f_1, g_1) & \text{se } \hat{\lambda}_1(\phi_E, v_E) \leq x/t < \hat{\lambda}_1(\phi_*, v_*) \\ (\phi_*, v_*) & \text{se } \hat{\lambda}_1(\phi_*, v_*) < x/t < s_2 \\ (\phi_D, v_D) & \text{se } s_2 < x/t < \infty \end{cases} \quad (4.60)$$

iv) choque-1/rarefação-2:

$$(\phi, v) = \begin{cases} (\phi_E, v_E) & \text{se } -\infty < x/t < s_1 \\ (\phi_*, v_*) & \text{se } s_1 < x/t < \hat{\lambda}_1(\phi_*, v_*) \\ (f_2, g_2) & \text{se } \hat{\lambda}_2(\phi_*, v_*) \leq x/t < \hat{\lambda}_2(\phi_D, v_D) \\ (\phi_D, v_D) & \text{se } \hat{\lambda}_2(\phi_D, v_D) < x/t < \infty \end{cases} \quad (4.61)$$

onde f_1, g_1, f_2, g_2 dependem da razão x/t e são obtidas a partir dos invariantes de

Riemann. As funções g_1 e g_2 são dadas por:

$$\begin{aligned} g_1 = \hat{g}_1(x/t) &= v_E - \int_{\phi_E}^{\hat{f}_1(x/t)} \frac{1}{\xi} \sqrt{\frac{dp}{d\xi}} d\xi, \quad p = \hat{p}(\xi) \\ g_2 = \hat{g}_2(x/t) &= v_D + \int_{\phi_E}^{\hat{f}_2(x/t)} \frac{1}{\xi} \sqrt{\frac{dp}{d\xi}} d\xi, \quad p = \hat{p}(\xi) \end{aligned} \quad (4.62)$$

As funções f_1 e f_2 são obtidas a partir das seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \frac{x}{t} = v_E - \frac{d}{df_1} \left[f_1 \int_{\phi_E}^{f_1} \frac{1}{\xi} \sqrt{\frac{dp}{d\xi}} d\xi \right], \quad p = \hat{p}(\xi) \\ \frac{x}{t} = v_D - \frac{d}{df_2} \left[f_2 \int_{\phi_D}^{f_2} \frac{1}{\xi} \sqrt{\frac{dp}{d\xi}} d\xi \right], \quad p = \hat{p}(\xi) \end{aligned} \quad (4.63)$$

4.5. O Problema de Riemann Associado

O problema de Riemann associado ao problema a ser estudado neste trabalho – essencialmente associado a uma classe de problemas que descrevem o transporte de m poluentes em um gás ideal, é composto por um sistema de $m+2$ equações diferenciais parciais, descritas no capítulo 2.

O problema homogêneo associado à equação (2.45), sujeito a uma condição inicial dada por uma função contínua por partes – uma função degrau – é denominado problema de Riemann [38], [39].

As condições iniciais são dadas pelos estados constantes à esquerda $((\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E)$ e à direita $((\rho)_D, (\rho v)_D, (\rho \omega_i)_D)$, respectivamente. Este sistema hiperbólico é não linear, uma vez que a derivada da pressão em relação à massa específica – representada por p' , foi suposta positiva e os auto-valores não são constantes.

Desta forma, o problema de Riemann associado à (4.28), é um caso especial de problema de valor inicial, descrito na seguinte forma matricial:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho \omega_i \end{bmatrix} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -v^2 + p' & 2v & 0 \\ -v\omega_i & \omega_i & v \end{bmatrix}}_{\text{Matriz Jacobiana} = \mathbf{A}(\mathbf{u})} \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho \omega_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad -\infty < x < +\infty, \quad t > 0 \quad (4.64)$$

onde

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho \omega_i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho \omega_i v \end{bmatrix} \quad (4.65)$$

com

$$\begin{cases} (\rho, \rho v, \rho \omega_i) = ((\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E), & \text{se } x < 0 \\ (\rho, \rho v, \rho \omega_i) = ((\rho)_D, (\rho v)_D, (\rho \omega_i)_D), & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad i = 1, m \quad (4.66)$$

É importante observar que as variáveis ρ , v e ω_i são funções tanto de x como de t , sujeitas a dados iniciais representados por uma função degrau – especificados na equação (4.66), onde $((\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E)$ representa o valor da função à esquerda de $x=0$ enquanto $((\rho)_D, (\rho v)_D, (\rho \omega_i)_D)$ é o valor da função à direita de $x=0$, sendo $(\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E, (\rho)_D, (\rho v)_D$ e $(\rho \omega_i)_D$ constantes previamente conhecidas.

Pelo fato do problema de Riemann ser invariante a transformações de similaridade, temos que $(\rho, \rho v, \rho \omega_i)$ depende apenas de x/t . Isto permite representar o problema de Riemann descrito por (4.64)-(4.66) em função de uma variável de similaridade $\xi = x/t$.

Assim, substituindo $\xi = x/t$, o problema de Riemann associado pode ser reescrito como:

$$-\xi \frac{d}{d\xi} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho \omega_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -v^2 + p' & 2v & 0 \\ -v\omega_i & \omega_i & v \end{bmatrix} \frac{d}{d\xi} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho \omega_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad -\infty < \xi < +\infty \quad (4.67)$$

com

$$\begin{cases} (\rho, \rho v, \rho \omega_i) = ((\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E) & \text{para } \xi \rightarrow -\infty \\ (\rho, \rho v, \rho \omega_i) = ((\rho)_D, (\rho v)_D, (\rho \omega_i)_D) & \text{para } \xi \rightarrow +\infty \end{cases} \quad i = 1, m \quad (4.68)$$

A solução generalizada do sistema (4.67)-(4.68) é o primeiro passo para a simulação do sistema original apresentado na equação (2.45), que permite descrever o transporte advectivo de um poluente na atmosfera. Esta simulação será implementada empregando-se o esquema de diferenças de proposto Chorin [7], a partir do trabalho de Glimm [6], combinado a um esquema de fatoração do operador [40], que permite levar em conta sua parte não homogênea.

4.5.1. Solução do Problema de Riemann Associado

O primeiro procedimento para se chegar à solução do problema de Riemann associado é calcular os invariantes de Riemann, que são obtidos a partir da equação abaixo:

$$\det \begin{bmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ -v^2 + p' & 2v - \lambda & 0 \\ -v\omega_i & \omega_i & v - \lambda \end{bmatrix} = 0 \quad i = 1, m \quad (4.69)$$

cuja solução, em ordem crescente, é dada por

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= v - \sqrt{p'}; & \lambda_{2,3,\dots,m+1} &= v; & \lambda_{m+2} &= v + \sqrt{p'} \\ \lambda_j &= v + a_j \sqrt{p'} & \text{com } a_1 &= -1, & a_{m+2} &= +1 & \text{ e } & a_{2,3,\dots,m+1} = 0 \end{aligned} \quad (4.70)$$

Assim, (4.59) representa um sistema genuinamente hiperbólico e o sistema formado pelas equações (4.67)-(4.68) é denominado problema de Riemann. Além disso, se o sinal da segunda derivada p'' não se alterar, então o problema é genuinamente não-linear.

A solução generalizada do problema de Riemann, que depende apenas da razão $\xi = x/t$, é encontrada fazendo-se a conexão de um estado à esquerda $((\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E)$ a um estado à direita $((\rho)_D, (\rho v)_D, (\rho \omega_i)_D)$ através de estados intermediários $((\rho)_{*1}, (\rho v)_{*1}, (\rho \omega_i)_{*1})$ e $((\rho)_{*2}, (\rho v)_{*2}, (\rho \omega_i)_{*2})$. Representa-se esta ligação por $((\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E) \rightarrow ((\rho)_{*1}, (\rho v)_{*1}, (\rho \omega_i)_{*1}) \rightarrow ((\rho)_{*2}, (\rho v)_{*2}, (\rho \omega_i)_{*2}) \rightarrow ((\rho)_D, (\rho v)_D, (\rho \omega_i)_D)$.

Aqui, *1 e *2 indicam os estados intermediários constantes a serem determinados.

As conexões entre os estados $E \rightarrow *1$, $*1 \rightarrow *2$ e $*2 \rightarrow D$, como mostrado no início deste capítulo, tanto podem ocorrer por rarefações como por choques. Dois estados são conectados por uma rarefação- j – uma solução contínua do problema de Riemann – quando o autovalor correspondente λ_j for uma função crescente de $\xi = x/t$ entre esses estados. Neste caso, a solução entre os estados depende continuamente de ξ .

Por outro lado, se o autovalor λ_j for uma função não crescente de $\xi = x/t$, os estados são conectados por uma solução descontínua, que é um choque- j .

É importante lembrar que (4.67) é válida apenas nas regiões onde $(\rho, \rho v, \rho \omega_i)$ é constante ou seja, $\lambda_j = \xi = x/t$. Para que $(\rho, \rho v, \rho \omega_i)$ possa ser uma função

contínua não crescente em uma região do plano $x-t$, o autovalor correspondente deve, necessariamente, crescer com x/t , uma vez que $\lambda = x/t$.

Soluções contínuas não constantes das equações (4.67)-(4.68) são chamadas rarefações. Uma rarefação- j – associada ao autovalor λ_j – ocorre quando a seguinte condição é satisfeita:

$$\begin{bmatrix} -\lambda_j & 1 & 0 \\ -v^2 + p' & -\lambda_j + 2v & 0 \\ -v\omega_i & \omega_i & -\lambda_j + v \end{bmatrix} \frac{d}{d\xi} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho\omega_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad i=1,m \quad (4.71)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} -\lambda_j d\rho + d(\rho v) &= 0 & \text{e} \\ -v\omega_i d\rho + \omega_i d(\rho v) + (v - \lambda_j) d(\rho\omega_i) &= 0 \end{aligned} \quad i=1,m \quad (4.72)$$

A primeira equação de (4.72) permite concluir que,

$$\begin{aligned} -a_j \sqrt{p'} d\rho + \rho dv &= 0 \\ \Rightarrow \mathfrak{R}_j = v - \int a_j \left(\frac{\sqrt{p'}}{\rho} \right) d\rho &= \text{constante} \end{aligned} \quad (4.73)$$

onde \mathfrak{R}_j representa o j -ésimo invariante de Riemann .

Combinando a segunda equação de (4.72) com (4.73), pode-se concluir que

$$d(\omega_i) = 0 \Rightarrow \omega_i = \text{constante} \quad i=1,m$$

isto é, no interior das regiões de rarefação, a variável ω_i é constante. A equação (4.73)

permite calcular a variação de ρ e v .

Considerando os estados locais $((\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E)$ e $((\rho)_D, (\rho v)_D, (\rho \omega_i)_D)$ – representando os estados à esquerda e à direita, respectivamente – conectados por uma rarefação- j tem-se :

$$\begin{aligned} (\omega_i)_E &= (\omega_i)_D \\ v_D - v_E &= \int_{\rho_E}^{\rho_D} a_j \left(\frac{\sqrt{p'}}{\rho} \right) d\rho \end{aligned} \quad (4.74)$$

ou, escrevendo a última equação de (4.74) em função do autovalor λ_j ,

$$\lambda_{jD} - \lambda_{jE} = a_j \sqrt{p_D'} - a_j \sqrt{p_E'} + \int_{\rho_E}^{\rho_D} a_j \left(\frac{\sqrt{p'}}{\rho} \right) d\rho = a_j \int_E^D \frac{d(\rho \sqrt{p'})}{\rho} \quad (4.75)$$

Conclui-se, então, que os estados à direita e à esquerda são conectados por uma rarefação- j sempre que a integral indefinida $\int a_j \frac{d(\rho \sqrt{p'})}{\rho}$ for uma função estritamente crescente de ρ .

Uma condição suficiente para isto é que o termo $\rho p'' + 2p'$ nunca mude o seu sinal, sendo estritamente positivo ou negativo. Esta condição é satisfeita, por exemplo, se $p = \gamma \rho^n$, para $n > 0$ – englobando, assim, todos os processos politrópicos e isotérmicos para gases ideais. Ao longo deste trabalho será suposto que $p = \gamma \rho^n$ com $\gamma > 0$ e $n = 1$, descrevendo, desta forma, processos isotérmicos.

Considerando um estado fixado à esquerda $((\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E)$ conectado a um estado local à direita $((\rho)_D, (\rho v)_D, (\rho \omega_i)_D)$ por uma rarefação-1, então $\rho_D < \rho_E$, uma vez que o autovalor correspondente é obtido considerando-se $a_1 = -1$. Se um estado fixado à direita $((\rho)_D, (\rho v)_D, (\rho \omega_i)_D)$ for conectado por uma rarefação- $m+2$ a

um estado local a esquerda $((\rho)_E, (\rho v)_E, (\rho \omega_i)_E)$, com $a_{m+2} = +1$, na equação (4.75), então, $\rho_E < \rho_D$.

Um caso particular é verificado no problema (4.67)-(4.68), quando a conexão entre os estados intermediários *1 e *2 é um choque de contato [37]. A conexão que seria chamada de rarefação-2, 3, ..., m+1 – para uma solução contínua – não pode ser verificada neste caso, uma vez que $a_{2,3,\dots,m+1} = 0$ e dv tem que se anular para uma rarefação deste tipo.

A equação (4.70) indica que os auto-valores $\lambda_{2,3,\dots,m+1}$ não podem crescer com x/t , pois são coincidentes com a velocidade do choque. Este choque de contato é caracterizado pela ausência de salto para as variáveis ρ e ρv – de tal forma que $(\rho)_{*1} = (\rho)_{*2}$ e $(\rho v)_{*1} = (\rho v)_{*2}$. O salto é verificado apenas para $\rho \omega_i$, $i = 1, m$, com uma velocidade de propagação v ($s_{2,3,\dots,m+1} = \lambda_{2,3,\dots,m+1} = v$), sendo que, neste caso, o valor da velocidade coincide com o autovalor correspondente.

Um choque de contato pode ser visto como o caso limite de uma rarefação na qual o leque de rarefação é reduzido a uma única linha. Essencialmente, seria uma descontinuidade com o autovalor associado correspondendo exatamente à velocidade do choque. Ao contrário dos choques comuns, o choque de contato é reversível, sem qualquer geração de entropia associada [37].

A presença deste tipo de choque origina uma solução que pode ser composta por m rarefações (considerando as variáveis ρ e ρv) sempre que $\rho_D > \rho_* < \rho_E$, sendo ρ_* a única raiz do sistema

$$\begin{aligned}
v_* - v_E &= \int_{\rho_E}^{\rho_*} - \left(\frac{\sqrt{p'}}{\rho} \right) d\rho \\
v_D - v_* &= \int_{\rho_*}^{\rho_D} + \left(\frac{\sqrt{p'}}{\rho} \right) d\rho
\end{aligned} \tag{4.76}$$

Se for verificada a seguinte desigualdade abaixo

$$v_D - v_E > \left| \int_{\rho_E}^{\rho_D} - \left(\frac{\sqrt{p'}}{\rho} \right) d\rho \right| \tag{4.77}$$

então, a solução será do tipo rarefação-1/rarefação- $m+2$. Como (4.77) pode nunca ser satisfeita, é requerido um “alargamento” do espaço das soluções admissíveis de forma a permitir a existência de soluções descontínuas – chamadas soluções generalizadas para o problema de Riemann associado, que irão conectar, assim, os estados que não podem ser conectados por rarefações.

Como foi dito no início deste capítulo, dois estados conectados por uma solução descontínua devem satisfazer a condição de salto de Rankine-Hugoniot, dada, neste caso, por:

$$s_j = \frac{[[\rho v]]}{[[\rho]]} = \frac{[[\rho v^2 + p]]}{[[\rho v]]} = \frac{[[\rho v \omega_i]]}{[[\rho \omega_i]]} \quad i = 1, m \tag{4.78}$$

onde s_j representa a velocidade de propagação da descontinuidade e $[[f]]$, o salto da grandeza f . Verificou-se que um choque é um tipo especial de salto que satisfaz, além da condição de salto de Rankine-Hugoniot, as condições de entropia [37], dadas por

$$\lambda_{1*} < s_1 < \lambda_{1E}; \quad s_1 < \lambda_{2D} \tag{4.79}$$

para o choque-1,

$$\lambda_{1E} < s_2 = \lambda_{2*} < \lambda_{m+2D} \tag{4.80}$$

para o choque (descontinuidade) de contato 2 e

$$\lambda_{m+2_D} < s_{m+2} < \lambda_{m+2^*} ; \quad \lambda_{2^*} < s_{m+2} \quad (4.81)$$

para o choque- $m+2$.

Considerando o problema de Riemann representado pelas equações (4.67)-(4.68), dois estados dados são conectados por um choque- j , com velocidade s_j , sempre que a condição de salto representada pela equação (4.78) for satisfeita e o autovalor associado for uma função não crescente de $\xi = x/t$. Esta última condição é equivalente à condição de entropia para a classe de problemas tratada nas equações (4.67)-(4.68). Logo, sempre que $\rho_* > \rho_E$ os estados 1 e * serão conectados por um choque-1 (ao invés de uma rarefação-1), enquanto que * e 2 serão conectados por um choque- $m+2$ (ao invés de uma rarefação- $m+2$) sempre que $\rho_D < \rho_*$.

Combinando as 2 primeiras equações de (4.78), verifica-se que

$$[[\rho v]]^2 = [[\rho]] [[\rho v^2 + p]].$$

Assim, considerando dois estados locais D e E , tem-se que:

$$\begin{aligned} (\rho_E v_E - \rho_D v_D)^2 &= (\rho_E - \rho_D) (\rho_E v_E^2 - \rho_D v_D^2 + p_E - p_D) \\ \frac{\rho_E \rho_D v_D^2}{\rho_E \rho_D} + \frac{\rho_E \rho_D v_E^2}{\rho_E \rho_D} - 2 \frac{\rho_E v_E \rho_D v_D}{\rho_E \rho_D} &= \frac{(\rho_E - \rho_D) (p_E - p_D)}{\rho_E \rho_D} \\ (v_D - v_E)^2 &= \left(\frac{1}{\rho_D} - \frac{1}{\rho_E} \right) (p_E - p_D) \\ (v_D - v_E) &= \pm \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_D} - \frac{1}{\rho_E} \right) (p_E - p_D)} \end{aligned} \quad (4.82)$$

Neste ponto, é necessário fazer a escolha do sinal a ser utilizado. Esta escolha é baseada na condição de entropia, que seria violada caso o sinal positivo fosse

considerado, resultando num choque de rarefação. Conseqüentemente, apenas o sinal negativo apresenta sentido físico.

Resumindo, quando um estado à esquerda é conectado a um estado intermediário * por um choque-1, as condições de salto representadas na equação (4.78) permitem concluir que:

$$v_* - v_E = -\sqrt{\left[\left(\frac{1}{\rho_*} - \frac{1}{\rho_E}\right)(p_E - p_*)\right]} \quad (4.83)$$

e quando um estado intermediário * é conectado a um estado à direita por meio de um choque- $m+2$, as condições representadas em (4.78) conclui-se que:

$$v_D - v_* = -\sqrt{\left[\left(\frac{1}{\rho_D} - \frac{1}{\rho_*}\right)(p_* - p_D)\right]} \quad (4.84)$$

Sempre que $\rho_D < \rho_* > \rho_E$, a solução é dada por choque-1/choques-2,3, $m+1$ (de contato)/ choque- $m+2$, sendo a massa específica no estado intermediário * dada pela única raiz do sistema obtido pela combinação das equações (4.83) e (4.84) e, como p é uma função crescente de ρ , a seguinte relação deve ser satisfeita

$$v_D - v_E < -\sqrt{\left[\left(\frac{1}{\rho_D} - \frac{1}{\rho_E}\right)(p_E - p_D)\right]} \quad (4.85)$$

Logo, a solução rarefação-1/choques-2,3, $m+1$ (de contato)/ rarefação- $m+2$, que corresponde a $\rho_D > \rho_* < \rho_E$, é verificada quando a equação (4.77) é satisfeita, enquanto que a solução choque-1/choques-2,3, $m+1$ (de contato)/choque- $m+2$, correspondente a $\rho_D < \rho_* > \rho_E$, ocorre se a equação (4.85) for satisfeita. No entanto, se as desigualdades anteriores não forem verificadas, a solução pode ser dos seguintes tipos:

- rarefação-1/choques-2,3,m+1 (de contato)/choque-m+2, que corresponde a $\rho_D < \rho_* < \rho_E$, o que ocorre quando

$$-\int_{\rho_E}^{\rho_D} \left(\frac{\sqrt{p'}}{\rho} \right) d\rho > v_D - v_E > -\sqrt{\left[\left(\frac{1}{\rho_D} - \frac{1}{\rho_E} \right) (p_E - p_D) \right]} \quad (4.86)$$

- choque-1/ choques-2,3,m+1 (de contato) /rarefação-m+2, correspondente a $\rho_D > \rho_* > \rho_E$, que ocorre se

$$\int_{\rho_E}^{\rho_D} \left(\frac{\sqrt{p'}}{\rho} \right) d\rho > v_D - v_E > -\sqrt{\left[\left(\frac{1}{\rho_D} - \frac{1}{\rho_E} \right) (p_E - p_D) \right]} \quad (4.87)$$

4.5.2. Análise do Salto na Conexão *1 \rightarrow *2

Considerando esta conexão caracterizada pelos autovalores $\lambda_{2,3,\dots,m+1} = v$, a velocidade de choque associada, s , utilizando a primeira equação em (4.78) que determina que v seja constante quando $\omega_i, i = 1, m$ apresentar um salto, pode ser dada por:

$$s_{2,3,\dots,m+1} = \frac{[[\rho v]]}{[[\rho]]} = \frac{[[\rho]]v}{[[\rho]]} \Rightarrow \lambda_{2,3,\dots,m+1} = s_{2,3,\dots,m+1} = v \Rightarrow \text{Choques de Contato} \quad (4.88)$$

Como a velocidade de propagação do salto é o próprio v , tem-se $v_{*1} = v_{*2}$, e não existe salto de velocidade entre esses dois estados. A partir da segunda equação em (4.78) para calcular o salto, tem-se que $[[p]] = 0$. Logo, não há salto para a pressão entre esses estados, permitindo concluir que $\rho_{*1} = \rho_{*2}$, uma vez que $p = \hat{p}(\rho)$.

Consequentemente, não há salto nem da velocidade nem da massa específica entre os estados dados. Assim, somente a fração em massa do i -ésimo poluente presente na mistura, ω_i , pode apresentar um salto, que, de acordo com a terceira equação de (4.78), é dado por:

$$s_{2,3,\dots,m+1} = \frac{[[\rho v \omega_i]]}{[[\rho \omega_i]]} = \frac{\rho v [[\omega_i]]}{\rho [[\omega_i]]} = v \Rightarrow \frac{[[\omega_i]]}{[[\omega_i]]} = 1 \quad (4.89)$$

Isto permite concluir que, além das restrições advindas das condições iniciais, não há restrições a serem satisfeitas pelo salto de $\omega_i, i = 1, m$ entre os estados $*1 \rightarrow *2$.

Além disso, observando a equação (4.70), verifica-se que a variável ω_i não tem influência nos autovalores. A conexão $*1 \rightarrow *2$ é caracterizada por $\omega_{i*1} = \omega_{iE}$ e $\omega_{i*2} = \omega_{iD}$. Isto permite chegar a uma conclusão importante: os poluentes se propagam com uma velocidade v , sendo, portanto, arrastados pela atmosfera.

As condições acima permitem que as conexões no problema de Riemann referenciado nas equações (4.67)-(4.68) sejam resumidas como:

$$\begin{array}{ccccc}
 E & \xRightarrow{R_1 \text{ ou } C_1} & *1 & \xRightarrow{\text{Choques de Contato}} & *2 & \xRightarrow{R_{m+2} \text{ ou } C_{m+2}} & D \\
 & & \omega_{i*1} = \omega_{iE} & (i = 2, \dots, m+1) & \omega_{i*2} = \omega_{iD} & & \\
 & & \rho_{*1} = \rho_{*2} = \rho_* & & & & \\
 & & v_{*1} = v_{*2} = v_* & & & &
 \end{array} \quad (4.90)$$

Aqui, R_1 e R_{m+2} representam a possibilidade das conexões entre os estados 1 e $m+2$ serem rarefações, enquanto C_1 e C_{m+2} referem-se à possibilidades dessas conexões ocorrerem através de choques. Uma simplificação importante é possível devido ao resultado obtido acima, permitindo reduzir o problema a duas variáveis (v e ρ) com apenas duas conexões a serem determinadas, isto é, $E \xRightarrow{R_1 \text{ ou } C_1} * \xRightarrow{R_{m+2} \text{ ou } C_{m+2}} D$.

Desta forma, os estados referidos podem ser conectados tanto por uma rarefação- j como por um choque- j . Para determinar tais conexões, o primeiro procedimento é supor conexões do tipo rarefação- j , que representam soluções contínuas e verificar se os autovalores λ_j correspondentes são funções crescentes de ξ entre esses estados, caracterizando, neste caso, a conexão tipo rarefação. Isto pode ser obtido substituindo os autovalores λ_1 e λ_{m+2} na equação para os invariantes de Riemann, resultando em

$$v = \int \pm \sqrt{p'} \frac{d\rho}{\rho} \quad (4.91)$$

A equação (4.73) permite concluir que o j -ésimo invariante de Riemann depende da relação constitutiva para a pressão como uma função da massa específica. Um processo politrópico é caracterizado pela equação $p = \gamma \rho^n$, com o j -ésimo invariante de Riemann representado por uma função de n .

Um processo isotérmico para um gás ideal corresponde a $n=1$. Para $(\bar{c})^2 = RT$, $v = \int \pm \bar{c} \frac{d\rho}{\rho} = \pm \bar{c} \ln \rho + cte$. Logo, tem-se $v + \bar{c} \ln \rho = C_1$, para o primeiro invariante de Riemann e $v - \bar{c} \ln \rho = C_2$ para o invariante de Riemann $m+2$, respectivamente.

A região no plano $x-t$ onde o primeiro invariante de Riemann é constante é denotada como região de rarefação-1 relacionada ao autovalor λ_1 . Integrando a equação (4.73) tem-se:

$$\rho = \exp \left[\frac{\bar{c} \ln \rho_E + v_E - \bar{c} - \frac{x}{t}}{\bar{c}} \right] \quad (4.92)$$

Substituindo ρ , previamente determinado, em $v + \bar{c} \ln \rho = C_1$, v pode ser determinado da seguinte maneira:

$$v = 2v_E - \bar{c} - \frac{x}{t} \quad (4.93)$$

O invariante de Riemann $m+2$ é constante numa região de rarefação- $m+2$, relacionada ao autovalor λ_{m+2} . Considerando que a equação (4.73) conduz a $v - \bar{c} \ln \rho = C_2$, ρ e v podem ser dados por:

$$\rho = \exp \left[\frac{\bar{c} \ln \rho_D - v_D - \bar{c} + \frac{x}{t}}{\bar{c}} \right] \text{ e } v = 2v_D + \bar{c} - \frac{x}{t} \quad (4.94)$$

Neste ponto é importante observar que a igualdade $\lambda = x/t$ é válida somente na presença de um leque de rarefação e que o problema de autovalor somente faz sentido nas regiões de rarefações. Além disso, a formulação diferencial, dada pela equação (4.64), somente faz sentido se ρ , ρv e $\rho \omega_i$ forem funções diferenciáveis em todo o domínio considerado, caso contrário, as equações de balanço devem ser consideradas na sua forma integral, conhecida como formulação fraca a ser empregada quando dois estados dados não puderem ser conectados por uma solução contínua.

A formulação fraca, porém, conduz a uma solução fraca; sendo as funções candidatas a essas soluções aquelas com condições de salto que satisfaçam a condição de Rankine-Hugoniot estabelecida na equação (4.78) e determinada considerando a formulação fraca associada.

É importante lembrar, no entanto, como discutido no Capítulo 3, que soluções fracas não garantem a unicidade da solução. Portanto, uma condição adicional deve

ser verificada a fim de que a unicidade seja mantida. Tal condição, denominada condição de entropia, é originada dos problemas de dinâmica dos gases e indica que a entropia da solução exata deve crescer quando a solução cruza um choque.

Em resumo, pode-se concluir que quando dois estados são conectados por um choque com velocidade s_j , as condições de salto (4.78) associadas ao problema de Riemann estabelecido nas equações (4.67)-(4.68) devem ser satisfeitas.

4.6. Soluções Generalizadas para o Problema Riemann Associado

O problema de Riemann considerado nesta tese pode ser visto como uma generalização daquele tratado em Martins-Costa e Saldanha da Gama [41], que descreve um escoamento insaturado em um meio poroso. O primeiro passo para determinar a solução generalizada associada ao problema de Riemann é comparar ρ_* , ρ_E e ρ_D . Considerando que o choque-2,3,... $m+1$ está sempre presente, existem quatro diferentes soluções possíveis para o problema, sendo que em todos esses casos, a concentração ω_i $i = 1, m$ é tal que:

$$\begin{aligned} \omega_i &= \omega_{iE} = \text{constante}, \quad i = 1, m \quad \text{para } -\infty < x/t < s_2 \equiv v_* \\ \omega_i &= \omega_{iD} = \text{constante}, \quad i = 1, m \quad \text{para } s_2 \equiv v_* < x/t < +\infty \end{aligned} \quad (4.95)$$

- Solução choque-1 / choques-2,3,... $m+1$ (contato)/choque- $m+2$ ($\rho_D < \rho_* > \rho_E$)

Neste caso o campo massa específica é dado por:

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_E = \text{constante}, \quad \text{para } -\infty < x/t < s_1 \\ \rho &= \rho_* = \text{constante}, \quad \text{para } s_1 < x/t < s_{m+2} \\ \rho &= \rho_D = \text{constante}, \quad \text{para } s_{m+2} < x/t < +\infty \end{aligned} \quad (4.96)$$

e o campo de velocidade v é tal que:

$$\begin{aligned} v &= v_E = \text{constante, para } -\infty < x/t < s_1 \\ v &= v_* = \text{constante, para } s_1 < x/t < s_{m+2} \\ v &= v_D = \text{constante, para } s_{m+2} < x/t < +\infty \end{aligned} \quad (4.97)$$

- Solução rarefação-1/choques-2,3,... $m+1$ (contato)/rarefação- $m+2$ ($\rho_D > \rho_* < \rho_E$)

Neste caso o campo de massa específica é dado por:

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_E = \text{constante} && \text{para } -\infty < x/t < \lambda_{1_E} \\ \frac{x}{t} + \sqrt{p'} + \int_{\rho_E}^{\rho} \frac{\sqrt{p'}}{\rho} d\rho - v_E &= 0 && \text{para } \lambda_{1_E} < x/t < \lambda_{1_*} \\ \rho &= \rho_* = \text{constante} && \text{para } \lambda_{1_*} < x/t < \lambda_{m+2_*} \\ \frac{x}{t} - \sqrt{p'} - \int_{\rho_D}^{\rho} \frac{\sqrt{p'}}{\rho} d\rho - v_D &= 0 && \text{para } \lambda_{m+2_*} < x/t < \lambda_{m+2_D} \\ \rho &= \rho_D = \text{constante} && \text{para } \lambda_{m+2_D} < x/t < +\infty \end{aligned} \quad (4.98)$$

e o campo de velocidade v é tal que:

$$\begin{aligned} v &= v_E = \text{constante} && \text{para } -\infty < x/t < \lambda_{1_E} \\ v &= \frac{x}{t} + \sqrt{p'} && \text{para } \lambda_{1_E} < x/t < \lambda_{1_*} \\ v &= v_* = \text{constante} && \text{para } \lambda_{1_*} < x/t < \lambda_{m+2_*} \\ v &= \frac{x}{t} - \sqrt{p'} && \text{para } \lambda_{m+2_*} < x/t < \lambda_{m+2_D} \\ v &= v_D = \text{constante} && \text{para } \lambda_{m+2_D} < x/t < +\infty \end{aligned} \quad (4.99)$$

- Solução rarefação-1/choques-2,3,... $m+1$ (contato)/choque- $m+2$ ($\rho_D < \rho_* < \rho_E$)

Neste caso o campo de massa específica é dado por:

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_E = \text{constante} && \text{para } -\infty < x/t < \lambda_{1_E} \\ \frac{x}{t} + \sqrt{p'} + \int_{\rho_E}^{\rho} \frac{\sqrt{p'}}{\rho} d\rho - v_E &= 0 && \text{para } \lambda_{1_E} < x/t < \lambda_{1_*} \\ \rho &= \rho_* = \text{constante} && \text{para } \lambda_{1_*} < x/t < s_{m+2} \\ \rho &= \rho_D = \text{constante} && \text{para } s_{m+2} < x/t < +\infty \end{aligned} \quad (4.100)$$

e o campo de velocidade v é tal que:

$$\begin{aligned}
 v &= v_E = \text{constante} && \text{para } -\infty < x/t < \lambda_{1_E} \\
 v &= \frac{x}{t} + \sqrt{p'} && \text{para } \lambda_{1_E} < x/t < \lambda_{1_*} \\
 v &= v_* = \text{constante} && \text{para } \lambda_{1_*} < x/t < s_{m+2} \\
 v &= v_D = \text{constante} && \text{para } s_{m+2} < x/t < +\infty
 \end{aligned} \tag{4.101}$$

- Solução choque-1/choques-2,3,... $m+1$ (contato) /rarefação- $m+2$, ($\rho_D > \rho_* > \rho_E$)

Neste caso o campo de massa específica é dado por:

$$\begin{aligned}
 \rho &= \rho_E = \text{constante} && \text{para } -\infty < x/t < s_1 \\
 \rho &= \rho_* = \text{constante} && \text{para } s_1 < x/t < \lambda_{m+2_*} \\
 \frac{x}{t} - \sqrt{p'} - \int_{\rho_D}^{\rho} \frac{\sqrt{p'}}{\rho} d\rho - v_D &= 0 && \text{para } \lambda_{m+2_*} < x/t < \lambda_{m+2_D} \\
 \rho &= \rho_D = \text{constante} && \text{para } \lambda_{m+2_D} < x/t < +\infty
 \end{aligned} \tag{4.102}$$

e o campo de velocidade v é tal que:

$$\begin{aligned}
 v &= v_E = \text{constante} && \text{para } -\infty < x/t < s_1 \\
 v &= v_* = \text{constante} && \text{para } s_1 < x/t < \lambda_{m+2_*} \\
 v &= \frac{x}{t} - \sqrt{p'} && \text{para } \lambda_{m+2_*} < x/t < \lambda_{m+2_D} \\
 v &= v_D = \text{constante} && \text{para } \lambda_{m+2_D} < x/t < +\infty
 \end{aligned} \tag{4.103}$$

Em todas as soluções possíveis consideradas anteriormente, as variáveis λ são

tais que:

$$\begin{aligned}
 \lambda_{1_E} &= v_E - \sqrt{(p')_E} && \text{com } (p')_E = \left. \frac{dp}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_E} \\
 \lambda_{1_*} &= v_* - \sqrt{(p')_*} && \text{com } (p')_* = \left. \frac{dp}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_*} \\
 \lambda_{m+2_*} &= v_* + \sqrt{(p')_*} && \text{com } (p')_* = \left. \frac{dp}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_*} \\
 \lambda_{m+2_D} &= v_D + \sqrt{(p')_D} && \text{com } (p')_D = \left. \frac{dp}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_D}
 \end{aligned} \tag{4.104}$$

enquanto as variáveis s obedecem a:

$$s_1 = \frac{\rho_E v_E - \rho_* v_*}{\rho_E - \rho_*} \quad s_{2,3,\dots,m+1} = v_* \quad s_{m+2} = \frac{\rho_* v_* - \rho_D v_D}{\rho_* - \rho_D} \quad (4.105)$$

Uma integração exata pode ser obtida, por exemplo, para um gás ideal obedecendo a seguinte lei constitutiva, $p = c^2 \rho$, que caracteriza um processo isotérmico para o gás ideal.

$$\begin{aligned} \sqrt{p'} + \int_{\rho_E}^{\rho} \frac{\sqrt{p'}}{\rho} d\rho &= c + c \ln \rho - c \ln \rho_E \\ \sqrt{p'} + \int_{\rho_D}^{\rho} \frac{\sqrt{p'}}{\rho} d\rho &= c + c \ln \rho - c \ln \rho_D \end{aligned} \quad (4.106)$$

Capítulo 5

Aproximante de Riemann

Neste capítulo será apresentado um esquema adequado para a obtenção de uma aproximação numérica para um sistema hiperbólico não linear de equações diferenciais parciais. A metodologia consiste em combinar o esquema de Glimm com uma técnica de partição do operador, discutidos mais detalhadamente no Capítulo 6.

O procedimento de combinação da técnica de partição do operador com o método de Glimm vem sendo utilizado com sucesso na simulação numérica de outros problemas hiperbólicos não lineares. Alguns exemplos são a propagação de ondas de choque cilíndricas em fluidos [42], problemas de propagação de ondas em tubulações contendo gases [43], o enchimento de uma matriz porosa por um fluido [44], a propagação de ondas em tubulações elasto-viscoplásticas sujeitas a dano [40], a resposta de barras elásticas não lineares [39], o escoamento não isotérmico de um fluido Newtoniano através de matrizes porosas insaturadas [45] e o escoamento

insaturado de um fluido Newtoniano através de meios porosos – cobrindo a maioria dos casos unidimensionais de interesse [41] e [46].

Considera-se o sistema de equações como apresentado em (2.39), que descreve o transporte de m poluentes na atmosfera, que é considerada um gás ideal isotérmico e os poluentes são transportados radialmente. Por simplicidade, é feita uma redefinição conveniente das variáveis da seguinte forma: $F \equiv \tilde{\rho}$, $G \equiv \tilde{\rho}\tilde{v}$ e $H_i \equiv \tilde{\rho}\omega_i$, $i = 1, m$.

Assim, o problema inicial pode ser reescrito como:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial r} = -\frac{2}{r}G \\ \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{G^2}{F} + \tilde{p}\right) = -\frac{2}{r}\frac{G^2}{F} \\ \frac{\partial H_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{GH_i}{F}\right) = -\frac{2}{r}\frac{GH_i}{F} - \alpha_i\frac{H_i}{F}, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{cases} \quad (5.1)$$

Cabe lembrar que para resolver o problema (5.1) são necessários dados iniciais para a densidade de massa do gás, velocidade e concentração dos poluentes.

5.1. Descrição Física

Considerando o problema de Riemann associado ao sistema hiperbólico (5.1), chega-se à sua solução generalizada conectando-se os estados à esquerda (E) e à direita (D) através de dois estados intermediários constantes (*1 e *2) da seguinte maneira: $(F_E, G_E, H_{iE}) \rightarrow (F_{*1}, G_{*1}, H_{i*1}) \rightarrow (F_{*2}, G_{*2}, H_{i*2}) \rightarrow (F_D, G_D, H_{iD})$. As conexões entre os estados $E \rightarrow *1$, $*1 \rightarrow *2$ e $*2 \rightarrow D$ podem ocorrer por rarefações ou por choques, conforme discutido no Capítulo 4.

Uma situação particular de conexão é verificada no problema de Riemann associado ao problema (5.1) – a conexão entre os estados intermediários (*1 e *2) é sempre um choque de contato, através do qual não há salto para as variáveis F e G , de tal forma que $F_{*1} = F_{*2}$ e $G_{*1} = G_{*2}$. O salto é verificado somente para H_i , $i = 2, \dots, m+1$, com uma velocidade de propagação dada por G/F .

5.2. Aproximação Numérica

O sistema (5.1) é aproximado através da utilização do esquema de Glimm combinado com uma técnica de partição do operador. O método de Glimm, especificamente desenvolvido para tratar problemas hiperbólico não lineares, consiste em combinar de forma apropriada a solução de um certo número de problemas de Riemann previamente escolhidos, para avançar do tempo $t = t_n$ para o tempo $t_{n+1} = t_n + \Delta t$. O método de Glimm é baseado em uma teoria cuja formulação matemática possui uma forte base termodinâmica, que pode ser expressa pela condição de entropia [37].

O referido esquema aproxima a parte homogênea do operador hiperbólico associado ao problema (5.1) para avançar do tempo n para o tempo $n+1$; combinando, como já foi mencionado, de forma apropriada, a solução (ou aproximação) de tantos problemas de Riemann quantos forem necessários para avançar de um tempo $t = t_n$ para um tempo $t_{n+1} = t_n + \Delta t$. Neste sentido, o esquema de Glimm requer o conhecimento prévio da solução (ou de uma aproximação) do problema de Riemann associado. Desta forma, o primeiro passo consiste em aproximar a condição inicial dada por uma função da posição r por funções

constantes por partes – funções degrau – uniformemente distribuídas, por conveniência. Na sequência, um problema de Riemann, um problema de valor inicial, cuja condição inicial é, necessariamente, uma função degrau, é resolvido de forma exata ou através do emprego de um aproximante, para cada dois passos consecutivos.

O procedimento numérico usado para avançar do tempo $t = t_n$ para $t = t_{n+1}$ pode ser definido combinando o problema homogêneo associado ao problema (5.1) com as seguintes condições iniciais:

$$F = \hat{F}_n(r) ; G = \hat{G}_n(r) ; H = \hat{H}_i(r) , i = 1, 2, \dots, m \text{ em } t = t_n \quad (5.2)$$

5.2.1. Técnica de Partição do Operador

O primeiro passo para aproximar os campos F, G e H_i no tempo $t = t_{n+1}$ consiste em empregar uma técnica de partição do operador, que decompõe o operador apresentado no problema (5.1) em uma parte puramente hiperbólica, representada pelo problema homogêneo associado ao problema original, evoluindo tanto no espaço como no tempo e em uma outra parte representada por um problema evolutivo no tempo apenas, que consiste em um sistema de equações diferenciais ordinárias. Estes dois problemas, de fato simultâneos, são tratados de forma sequencial, ou seja utiliza-se uma aproximação inicial, obtida avançando-se Δt no tempo através das equações representando o problema homogêneo, usando o método de Glimm. Um vez avaliada esta aproximação, a aproximação numérica para a solução de F, G e H_i , $i = 1, m$ em $t = t_{n+1}$ é finalmente alcançada, avançando-se no tempo com o mesmo passo

$\Delta t = t_{n+1} - t_n$, para resolver o problema evolutivo no tempo, através do seguinte sistema de equações:

$$\left. \begin{cases} \frac{\partial F}{\partial t} = -\frac{2}{r}G \\ \frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{2}{r}\frac{G^2}{F} \\ \frac{\partial H_i}{\partial t} = -\frac{2}{r}\frac{GH_i}{F} - \alpha_i \frac{H_i}{F}, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{cases} \right\} \begin{matrix} F = \hat{F}_{n+1}(r) \\ G = \hat{G}_{n+1}(r) \\ H_i = \hat{H}_{i_{n+1}}(r) \end{matrix} \text{ em } t = t_n \quad (5.3)$$

O sistema de equações diferenciais ordinárias (5.3) é simulado através da seguinte aproximação (Euler):

$$\begin{aligned} F &= \hat{F}_{n+1}(r) \approx \tilde{F}_{n+1}(r) - \left\{ \frac{2}{r} \tilde{G}_{n+1}(r) \right\} \Delta t \\ G &= \hat{G}_{n+1}(r) \approx \tilde{G}_{n+1}(r) - \left\{ \frac{2}{r} \frac{[\tilde{G}_{n+1}(r)]^2}{\tilde{F}_{n+1}(r)} \right\} \Delta t \\ H_i &= \hat{H}_{i_{n+1}}(r) \approx \tilde{H}_{i_{n+1}}(r) - \left\{ \frac{2}{r} \frac{\tilde{G}_{n+1}(r) \tilde{H}_{i_{n+1}}(r)}{\tilde{F}_{n+1}(r)} + \alpha_i \frac{\tilde{H}_{i_{n+1}}(r)}{\tilde{F}_{n+1}(r)} \right\} \Delta t, \quad i = 1, m \end{aligned} \quad (5.4)$$

5.2.2. O Esquema de Glimm

Os campos $\tilde{F}_{n+1}(r)$, $\tilde{G}_{n+1}(r)$ e $\tilde{H}_{i_{n+1}}(r)$, $i = 1, m$ usados como dados iniciais em (5.3) são obtidos avançando-se Δt no tempo, via método de Glimm, através do seguinte problema homogêneo:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{G^2}{F} + \tilde{p}(F) \right) = 0 \\ \frac{\partial H_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{GH_i}{F} \right) = 0, \quad i = 1, m \end{array} \right\} \begin{array}{l} F = \hat{F}_n(r) \\ G = \hat{G}_n(r) \\ H_i = \hat{H}_{i_n}(r) \end{array} \quad \text{em } t = t_n \quad (5.5)$$

A solução do problema de Riemann associado ao sistema hiperbólico (5.5) é obtida através da conexão dos estados à esquerda (E) e à direita (D), por meio de dois estados intermediários (*1 e *2), da seguinte maneira:

$$(F_E, G_E, H_{i_E}) \rightarrow (F_{*1}, G_{*1}, H_{i_{*1}}) \rightarrow (F_{*2}, G_{*2}, H_{i_{*2}}) \rightarrow (F_D, G_D, H_{i_D})$$

A conexão entre os estados $E \rightarrow *1$, $*1 \rightarrow *2$ e $*2 \rightarrow D$ pode ocorrer, como visto no Capítulo 3, tanto por rarefações como por choques. Um caso particular de conexão pode ser observado no problema de Riemann associado à (5.5) – a conexão entre os estados intermediários *1 e *2 é sempre um choque de contato [48], [37], ou seja, a conexão que poderia chamar-se 2-rarefação – e levaria à ocorrência de uma solução contínua – não pode ser encontrada no problema (5.5), cujo segundo autovalor coincide com a velocidade que deve ser constante. Este choque de contato se caracteriza pela ausência de salto para as variáveis F e G , de tal maneira que $F_{*1} = F_{*2}$ e $G_{*1} = G_{*2}$. O salto ocorre apenas para H_i , com uma velocidade de propagação $G/F \equiv v$.

Um choque de contato pode ser visto como o caso limite de uma rarefação no qual o leque de rarefação pode ser reduzido a uma simples linha, o que significa dizer que o autovalor associado à descontinuidade corresponde exatamente à velocidade do choque, ou seja, não ocorre geração de entropia. Ao contrário de choques normais, os choques de contato são reversíveis sem necessariamente estarem associado a qualquer geração de entropia [8].

Desta maneira, avança-se no tempo de um instante t_n para um instante t_{n+1} , ou seja, obtém-se $\tilde{F}_{n+1}(r)$, $\tilde{G}_{n+1}(r)$, e $\tilde{H}_{i_{n+1}}(r)$ $i=1,m$, que são as soluções de (5.5), avaliadas no tempo $t = t_{n+1}$.

A condição inicial arbitrária dada em função da posição r : $F(r,0)=F_0(r)$, $G(r,0)=G_0(r)$ e $H_i(r,0)=H_{i_0}(r)$ $i=1,m$ é aproximada por funções constantes por partes, escolhendo-se, por conveniência, os tamanhos dos intervalos iguais:

$$\begin{aligned} F &= \hat{F}_0(r) \approx F_{n_j} = \hat{F}_n(r_j + \theta_n \Delta r) \\ G &= \hat{G}_0(r) \approx G_{n_j} = \hat{G}_n(r_j + \theta_n \Delta r) \quad \text{para } r_j - \frac{\Delta r}{2} < r < r_j + \frac{\Delta r}{2} \\ H &= \hat{H}_{i_0}(r) \approx H_{i_{n_j}} = \hat{H}_{i_n}(r_j + \theta_n \Delta r) \end{aligned} \quad (5.6)$$

onde θ_n é um número escolhido aleatoriamente no intervalo aberto $(-1/2, +1/2)$ e Δr é o comprimento de cada passo ($\Delta r = r_{j+1} - r_j$).

Na seqüência, um problema de Riemann – um problema de valor inicial cuja condição inicial é uma função degrau – é resolvido – exatamente ou empregando um aproximante, para cada dois passos consecutivos.

As aproximações apresentadas nas equações (5.5), considerando um conjunto de dados iniciais (5.6), para cada dois passos consecutivos, levam ao seguinte problema de Riemann associado:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{G^2}{F} + \tilde{p}(F) \right) = 0 \\ \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{GH_i}{F} \right) = 0 \end{cases} \quad (5.7)$$

com

$$\begin{aligned}
(F, G, H_i) &= \left(F_{n_j}, G_{n_j}, H_{i_{n_j}} \right) \quad \text{para } t = t_n, \quad -\infty < r < r_j + \frac{\Delta r}{2} \\
(F, G, H_i) &= \left(F_{n_{j+1}}, G_{n_{j+1}}, H_{i_{n_{j+1}}} \right) \quad \text{para } t = t_n, \quad r_j + \frac{\Delta r}{2} < r < \infty
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Seja $F_{n_j}^R, G_{n_j}^R$ e $H_{i_{n_j}}^R$ a solução generalizada do problema de Riemann (5.7)-

(5.8). Então, a solução aproximada das equações (5.5), no tempo t_{n+1} será dada por:

$$\begin{aligned}
F &= \hat{F}_{n+1}(r) \approx F_{n_j}^R(r, t_{n+1}) \quad \text{para } r_j < r < r_{j+1} \\
G &= \hat{G}_{n+1}(r) \approx G_{n_j}^R(r, t_{n+1}) \quad \text{para } r_j < r < r_{j+1} \\
H &= \hat{H}_{i_{n+1}}(r) \approx H_{i_{n_j}}^R(r, t_{n+1}) \quad \text{para } r_j < r < r_{j+1}
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Para preservar as iterações entre choques próximos aos problemas de Riemann adjacentes, o passo de tempo Δt e, conseqüentemente, t_{n+1} , para o problema (5.8) devem ser selecionados de tal forma a garantir a unicidade da solução, exigindo que a solução fraca, satisfaça a condição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) [37], ou seja,

$$t_{n+1} - t_n \leq \frac{\Delta r}{2|\lambda|_{\max}} \tag{5.10}$$

onde $|\lambda|_{\max}$ é a velocidade máxima, em valor absoluto, da propagação do choque, considerando-se todos os problemas de Riemann no tempo t_n . Resumindo, a condição CFL expressa pela equação (5.10) garante a unicidade da solução.

5.3. Procedimento Alternativo – Aproximante de Riemann

O procedimento proposto nesta tese consiste em substituir as soluções exatas (e clássicas) do problema de Riemann associado (5.7)-(5.8) por uma aproximação para a solução exata – construída supondo-se que quaisquer que dois estados estejam sempre conectados por uma descontinuidade, que pode não satisfazer as condições de

entropia – de forma a avançar no tempo através do emprego do esquema de Glimm. Essencialmente, tal aproximação consiste em buscar uma solução fraca para o problema de Riemann associado, dentro de um espaço de funções constantes por partes (funções degrau) com um máximo de dois saltos. A grande vantagem deste procedimento é não requerer o conhecimento a priori de uma solução analítica do problema de Riemann associado, que além de nem sempre ser de fácil obtenção, tem um custo computacional maior, por envolver escolha de soluções.

Como já visto no Capítulo 4, uma solução generalizada para o problema de Riemann descrito pelas equações (5.7)-(5.8), dependendo de (r, t) , pode ser expressa em função da variável de similaridade $\xi = r/t$ [37] ,[41], sendo construída através da conexão dos estados à esquerda (E) e à direita (D) a estados intermediários (*) por rarefações ou choques, ou seja, $(F_E, G_E, H_{i_E}) \rightarrow (F_*, G_*, H_{i_*}) \rightarrow (F_D, G_D, H_{i_D})$ ou $(F_E, G_E) \rightarrow (F_*, G_*) \rightarrow (F_D, G_D)$.

Como no problema (5.7)-(5.8) a conexão entre os estados intermediários *1 e *2 é um choque de contato, que se caracteriza pela ausência de salto para as variáveis ρ e ρv de tal forma que $(\rho)_{*1} = (\rho)_{*2}$ e $(\rho v)_{*1} = (\rho v)_{*2}$. Assim, o salto é verificado somente para $\rho \omega_i$, $i=1, m$, com uma velocidade de propagação $v (= s_{2_i} = \lambda_{2_i})$, cuja velocidade assume o mesmo valor do autovalor correspondente.

Como já discutido, um choque de contato pode ser visto como um caso limite de uma rarefação no qual o leque de rarefação pode ser reduzido a uma única linha, ou seja, é uma descontinuidade cujo autovalor associado corresponde exatamente à velocidade de choque, não ocorrendo geração de entropia. Ao contrário de choques normais, os choques de contato são reversíveis sem necessariamente estarem associados a qualquer geração de entropia [39]. Desta forma, as três variáveis

existentes no problema (5.7)-(5.8) podem ser reduzidas a apenas duas (v e ρ) com somente duas conexões a serem determinadas [8], ou seja:

$$E \begin{matrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \end{matrix} * \begin{matrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \end{matrix} D \quad (5.11)$$

$$R_1 \text{ ou } C_1 \quad R_{m+2} \text{ ou } C_{m+2}$$

onde R_1 e R_{m+2} denotam possíveis rarefações, conectando os estados 1 e $m+2$, enquanto que C_1 e C_{m+2} referem-se a possíveis choques entre estas conexões.

Assim sendo, os referidos estados podem estar conectados por uma j -rarefação ou j -choque.

5.4. O Aproximante de Riemann – problema hidrodinâmico

A partir das considerações feitas anteriormente acerca do choque de contato, resumidas pela equação (5.11) pode-se expressar o problema de Riemann associado ao sistema de equações (5.7)-(5.8) como um sistema de duas variáveis apenas (v e ρ). Em suma, a solução do problema de Riemann é requerida apenas para as duas primeiras equações no sistema (5.7) e o problema de Riemann pode ser expresso como:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial r} &= 0 \\ \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{G^2}{F} + \tilde{p}(F) \right) &= 0 \end{aligned} \right\} t > \bar{t}, -\infty < r < \infty \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} (F, G) &= (F_E, G_E) \quad \text{para } t = \bar{t}, r < \bar{r} \\ (F, G) &= (F_D, G_D) \quad \text{para } t = \bar{t}, r > \bar{r} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Os autovalores calculados para o sistema (5.12)-(5.13) são dados, em ordem crescente, por:

$$\lambda_j = \frac{G}{F} + (-1)^j (\tilde{p}')^{1/2} = v + (-1)^j (\tilde{p}')^{1/2} \quad j=1,2 \quad (5.14)$$

onde G/F é a velocidade de propagação da descontinuidade..

Uma vez que \tilde{p}' é suposto positivo para todo r e t , o sistema (5.12) é um sistema hiperbólico (genuinamente não linear, uma vez que \tilde{p}'' é sempre positivo (ou negativo)). O problema (5.12)-(5.13) é chamado problema de Riemann, cuja solução generalizada depende da razão $(r - \bar{r})/(t - \bar{t})$, sendo esta dada pela conexão dos estados à esquerda (F_E, G_E) e à direita (F_D, G_D) , passando por estados intermediários (F_*, G_*) , ou seja, $E \underset{R_1 \text{ ou } C_1}{\rightleftharpoons} * \underset{R_{m+2} \text{ ou } C_{m+2}}{\rightleftharpoons} D$.

Como já foi visto, dois estados são conectados por uma rarefação- j – uma solução contínua do problema de Riemann associado – quando os autovalores correspondentes λ_j são funções crescentes de $(r - \bar{r})/(t - \bar{t})$ entre estes estados [48], [49]. Neste caso, a solução (F, G) depende continuamente de $(r - \bar{r})/(t - \bar{t})$ entre os dois estados e, associado a uma rarefação- j existe um invariante de Riemann dado por:

$$\mathfrak{R}_j = v - (-1)^j \int \left(\frac{\sqrt{\tilde{p}'}}{\rho} \right) d\rho = \text{constante} \quad j=1,2 \quad (5.15)$$

Este invariante representa um valor constante entre dois estados conectados por uma rarefação- j .

Se os autovalores λ_j são funções decrescentes de $(r - \bar{r})/(t - \bar{t})$, então os estados são conectados por um choque- j (uma solução descontínua) com velocidade de propagação s_j e, nesta situação, as condições de entropia são automaticamente satisfeitas. Como soluções fracas não garantem a unicidade da solução [47], é preciso que se verifique a condição de entropia para que a unicidade da solução seja

preservada. Considerando que dois estados estejam conectados por um choque- j , com velocidade s_j , a seguinte condição de salto, também chamada condição de Rankine-Hugoniot – associada à equação (5.12)-(5.13), deve ser satisfeita:

$$s_j = \frac{[[G]]}{[[F]]} = \frac{[[G^2/F + \tilde{p}]]}{[[G]]} \quad (5.16)$$

onde s_j representa a velocidade de propagação da descontinuidade e $[[f]]$ o salto de uma quantidade f .

A principal proposta deste trabalho é buscar uma aproximação para o problema de Riemann, que supõe a solução do problema em um espaço de funções constantes por partes, no qual dois estados quaisquer estejam conectados apenas por soluções descontínuas, isto é:

$$(F_E, G_E) \rightarrow \text{choque-1} \rightarrow (F_*, G_*) \rightarrow \text{choque-2} \rightarrow (F_D, G_D) \quad (5.17)$$

Esta aproximação não requer que sejam consideradas as quatro possibilidades do problema de Riemann original, ou seja:

$$(F_E, G_E) \begin{array}{c} \rightleftharpoons \\ \text{Raref. ou Choque} \end{array} (F_*, G_*) \begin{array}{c} \rightleftharpoons \\ \text{Raref. ou Choque} \end{array} (F_D, G_D) \quad (5.18)$$

Por outro lado, ela não assegura as condições de entropia. É importante notar que a aproximação referida na equação (5.17) satisfaz uma forma fraca das leis de conservação.

Assim, fazendo $z = (r - \bar{r}) / (t - \bar{t})$, $-\infty < z < \infty$, chega-se à solução generalizada do sistema (5.12)-(5.13), num espaço de funções constante por partes:

$$(F, G) = \begin{cases} (F_E, G_E), & \text{se } -\infty < z < s_1 \\ (F_*, G_*), & \text{se } s_1 < z < s_2 \\ (F_D, G_D), & \text{se } s_2 < z < \infty \end{cases} \quad (5.19)$$

Por exemplo, fazendo $\tilde{p} = \rho^2$, tem-se:

$$\begin{aligned}
v_* - v_E &= -(\rho_* - \rho_E) \left[\left(\frac{\tilde{p}_* - \tilde{p}_E}{\rho_* - \rho_E} \right) \frac{1}{\rho_* \rho_E} \right]^{1/2} \\
v_D - v_* &= -(\rho_D - \rho_*) \left[\left(\frac{\tilde{p}_D - \tilde{p}_*}{\rho_D - \rho_*} \right) \frac{1}{\rho_D \rho_*} \right]^{1/2}
\end{aligned} \tag{5.20}$$

sendo ρ_* a única raiz positiva de

$$v_D - v_E = (\rho_D - \rho_*) \left[\left(\frac{\tilde{p}_D - \tilde{p}_*}{\rho_D - \rho_*} \right) \frac{1}{\rho_D \rho_*} \right]^{1/2} - (\rho_* - \rho_E) \left[\left(\frac{\tilde{p}_* - \tilde{p}_E}{\rho_* - \rho_E} \right) \frac{1}{\rho_* \rho_E} \right]^{1/2} \tag{5.21}$$

onde as velocidades de propagação das descontinuidades são dadas por:

$$s_1 = \frac{G_* - G_E}{F_* - F_E} = \frac{\rho_* v_* - \rho_E v_E}{\rho_* - \rho_E} \quad \text{e} \quad s_2 = \frac{G_D - G_*}{F_D - F_*} = \frac{\rho_D v_D - \rho_* v_*}{\rho_D - \rho_*} \tag{5.22}$$

Neste momento, é conveniente que se avalie a componente v_* a partir da expressão:

$$\begin{aligned}
v_* - v_E &= \frac{1}{2} \left\{ -(\rho_* - \rho_E) \left[\left(\frac{\tilde{p}_* - \tilde{p}_E}{\rho_* - \rho_E} \right) \frac{1}{\rho_* \rho_E} \right]^{1/2} \right. \\
&\quad \left. - (\rho_D - \rho_*) \left[\left(\frac{\tilde{p}_D - \tilde{p}_*}{\rho_D - \rho_*} \right) \frac{1}{\rho_D \rho_*} \right]^{1/2} + \frac{v_E + v_D}{2} \right\}
\end{aligned} \tag{5.23}$$

As soluções para λ e s , para todos os estados considerados acima são tais que:

$$\begin{aligned}
\lambda_E &= (G/F)_E - \sqrt{(\tilde{p}')_E} \quad \text{com} \quad (\tilde{p}')_E = \frac{d\tilde{p}}{dF} \Big|_{F=F_E} \\
\lambda_{1_*} &= (G/F)_* - \sqrt{(\tilde{p}')_*} \quad \text{com} \quad (\tilde{p}')_* = \frac{d\tilde{p}}{dF} \Big|_{F=F_*} \\
\lambda_{m+2_*} &= (G/F)_* - \sqrt{(\tilde{p}')_*} \quad \text{com} \quad (\tilde{p}')_* = \frac{d\tilde{p}}{dF} \Big|_{F=F_*} \\
\lambda_D &= (G/F)_D - \sqrt{(\tilde{p}')_D} \quad \text{com} \quad (\tilde{p}')_D = \frac{d\tilde{p}}{dF} \Big|_{F=F_D}
\end{aligned} \tag{5.24}$$

onde,

$$s_1 = \frac{G_E - G_*}{F_E - F_*} ; s_{2,3,\dots,m+1} = (G/F)_* ; s_{m+2} = \frac{G_* - G_D}{F_* - F_D} \tag{5.25}$$

Capítulo 6

Esquema de Glimm e Técnica de Partição do Operador

6.1. O Esquema de Glimm

6.1.1. Introdução

James Glimm [6] introduziu o Método de Escolha Aleatória como uma prova construtiva da existência de soluções para uma classe de sistemas de leis de conservação hiperbólicos não lineares. A teoria deste método tem como base o estudo das iterações de ondas elementares na solução do problema de Riemann, cuja

formulação matemática apresenta uma forte base termodinâmica – representada pela condição de entropia.

O Método de Glimm é uma técnica semianalítica para tratar soluções descontínuas de sistemas hiperbólicos de leis de conservação, no qual soluções aproximadas são representadas por funções constantes por partes.

Chorin [7] modificou o método original e o transformou em uma ferramenta computacional para a solução numérica de leis de conservação hiperbólicas homogêneas. Colella [50] propôs um procedimento mais preciso e investigou uma extensão do esquema de Glimm a sistemas bidimensionais usando o método de partição do operador.

Entre as principais características do método de Glimm estão a sua capacidade de não dissipar o choque, preservando, assim, a sua magnitude e posição, além do baixo custo computacional se comparado a outros métodos de aproximação de problemas não lineares como o método de elementos finitos associado a uma técnica de captura de choques, por exemplo. Além disto, quando o comprimento dos passos tomados em relação à variável espacial tende a zero, a aproximação obtida tende a solução exata do problema, considerando, neste caso, a sua solução fraca.

No entanto, tal método apresenta uma inconveniente desvantagem uma vez que sua implementação, na simulação de problemas de valor inicial, requer o conhecimento prévio da solução completa do problema de Riemann associado a sistemas hiperbólicos.

Em essência, o método consiste em um procedimento numérico que utiliza a solução do problema de Riemann associado na geração de soluções aproximadas de equações hiperbólicas, sujeitas a condições iniciais arbitrárias. Os problemas de Riemann são problemas de valor inicial cuja condição inicial é, necessariamente, uma

função degrau. Como o esquema de Glimm constrói a solução para um problema de valor inicial a partir da solução de um certo número pré-determinado de problemas de Riemann associados, para marchar no tempo de um instante $t = t_n$ a um instante $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, a condição inicial arbitrária deve ser aproximada por funções constantes por partes.

A fim de evitar uma interação direta entre choques referentes a dois problemas de Riemann consecutivos, o avanço de tempo Δt deve ser escolhido de tal forma a satisfazer a condição de Courant-Friedrichs-Lewy [38], assegurando, desta forma, a unicidade da solução, ou seja,

$$\Delta t = t_{n+1} - t_n \leq \frac{\Delta r}{2|\lambda|_{\max}} \quad (6.1)$$

onde $|\lambda|_{\max}$ é a velocidade máxima de propagação, em valor absoluto, da descontinuidade considerando todos os problemas de Riemann no tempo t_n , ou seja, a norma do valor máximo dos autovalores do sistema.

O método de Glimm permite, assim, a construção de uma solução para problemas de valor inicial – conhecidos como sistemas hiperbólicos não lineares sujeitos a valores iniciais arbitrários – através da solução de um certo número de problemas de Riemann associados. A condição inicial arbitrária, dada por uma função da posição r é aproximada por funções constantes por partes, conhecidas como funções degrau. Em seguida, um problema de Riemann – um problema de valor inicial cuja condição inicial é necessariamente uma função degrau – deve ser resolvido para cada dois passos consecutivos.

Desta forma, o objetivo deste método é unir de forma apropriada a solução de tantos problemas de Riemann quantos forem necessários para evoluir de forma sucessiva de um tempo $t = t_n$ para um tempo $t_{n+1} = t_n + \Delta t$.

Este procedimento pode ser facilmente compreendido através da ilustração de um degrau genérico em um plano $r-t$, mostrado na Figura 6.1.

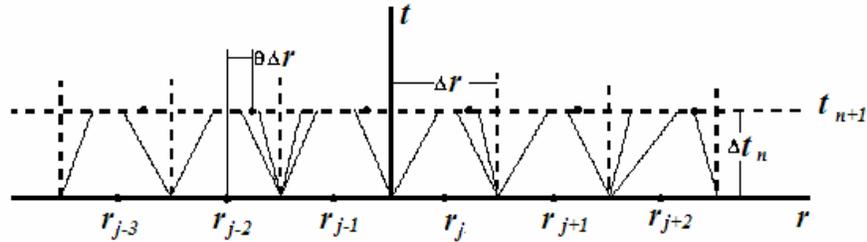


Figura 6.1 – Ilustração de um passo genérico no esquema de Glimm.

A Figura 6.1 ilustra a evolução de um instante de tempo t_n para um instante subsequente t_{n+1} , mostrando que a solução obtida no tempo t_{n+1} não é mais uma função degrau e, assim, uma nova escolha aleatória de θ_n , após cada passo de tempo, é requerida, a fim de construir a condição inicial para o próximo instante – que deve ser constante por partes. Aqui θ_n é um número escolhido aleatoriamente no intervalo $(-1/2, +1/2)$ e Δr é o tamanho de cada passo ($\Delta r = r_{i+1} - r_i$).

6.1.2. Aproximação Numérica

Uma aproximação inicial para os campos F , G e H no tempo t_{n+1} , denotada como \tilde{F}_{n+1} , \tilde{G}_{n+1} e $\tilde{H}_{i_{n+1}}$, é obtida pela aplicação do método de Glimm ao problema homogêneo associado, definido pelo seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{G^2}{F} + \tilde{p}(F) \right) = 0 \\ \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{GH_i}{F} \right) = 0, \quad i = 1, m \end{cases} \quad (6.2)$$

com

$$\begin{aligned} F &= \hat{F}_n(r) \quad \text{em } t = t_n \\ G &= \hat{G}_n(r) \quad \text{em } t = t_n \\ H &= \hat{H}_n(r) \quad \text{em } t = t_n \end{aligned} \quad (6.3)$$

Como o sistema homogêneo associado à equação (6.2) pode estar sujeito a um conjunto qualquer de dados arbitrários, é construída uma solução para este problema de valor inicial aproximando os dados iniciais por funções constantes por partes – as funções degrau, com degraus de mesma largura.

Antes de empregar o esquema de Glimm para a resolução das equações (6.2)-(6.3), porém, a solução (ou aproximação) do problema de Riemann associado deve ser conhecida.

Como (6.2) pode estar sujeita a quaisquer dados iniciais arbitrários é conveniente representá-los como:

$$\begin{aligned} F(r, 0) &= F_0(r) \\ G(r, 0) &= G_0(r) \\ H_i(r, 0) &= H_{i_0}(r) \end{aligned} \quad (6.4)$$

Assim, (6.2) e (6.4) caracterizam um problema de valor inicial. A implementação do esquema de Glimm requer a aproximação das condições iniciais (6.4) por funções degrau que, para o problema considerado neste trabalho, serão consideradas funções com larguras iguais dos passos.

O primeiro procedimento para empregar este esquema é aproximar os dados iniciais (no tempo t_n) pelas funções constantes por partes apresentadas a seguir:

$$\begin{aligned}
 F &= \hat{F}_n(r) \approx F_{n_j} = \hat{F}_n(r_j + \theta_n \Delta r) && \text{para } r_j - \frac{\Delta r}{2} < r < r_j + \frac{\Delta r}{2} \\
 G &= \hat{G}_n(r) \approx G_{n_j} = \hat{G}_n(r_j + \theta_n \Delta r) && \text{para } r_j - \frac{\Delta r}{2} < r < r_j + \frac{\Delta r}{2} \\
 H &= \hat{H}_n(r) \approx H_{n_j} = \hat{H}_n(r_j + \theta_n \Delta r) && \text{para } r_j - \frac{\Delta r}{2} < r < r_j + \frac{\Delta r}{2}
 \end{aligned} \tag{6.5}$$

onde, como mencionado anteriormente, θ_n é um número escolhido aleatoriamente no intervalo $(-1/2, +1/2)$ e Δr é o tamanho de cada passo ($\Delta r = r_{j+1} - r_j$). Tal procedimento é ilustrado pela aproximação mostrada na Figura 6.2.

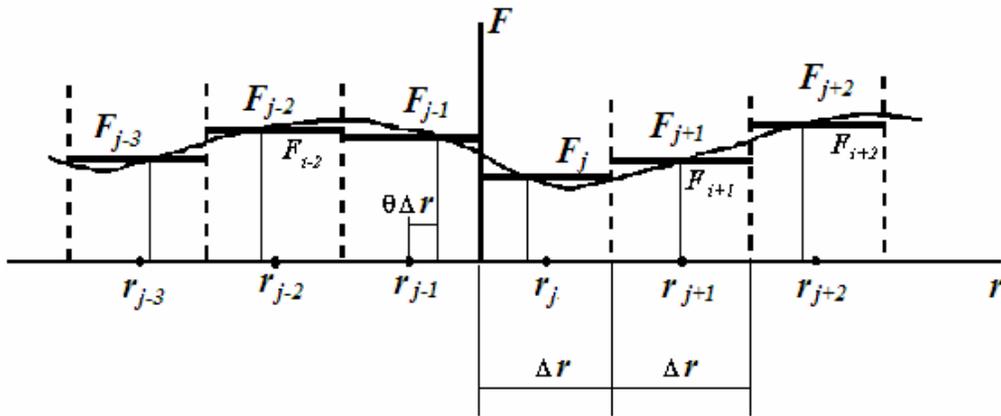


Figura 6.2 – Construção de uma distribuição constante por partes para uma função F .

As aproximações mostradas na equação (6.5) para os dados iniciais geram, para cada dois degraus consecutivos, um problema de valor inicial conhecido como problema de Riemann [37], associado às equações (6.2)-(6.3) desde que algumas condições sejam verificadas. Primeiro, o sistema deve ser hiperbólico e genuinamente não linear. A fim de garantir essa hipótese, a primeira derivada da pressão em relação

a massa específica, p' , deve ser positiva. Além disto, o problema de Riemann representa um tipo especial de problema de valor inicial definido, neste caso, como:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{G^2}{F} + p(F) \right) = 0 \\ \frac{\partial H_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{GH_i}{F} \right) = 0 \end{cases} \quad i = 1, m \quad (6.6)$$

com

$$\begin{aligned} (F, G, H) &= (F_{n_j}, G_{n_j}, H_{i_{n_j}}) \quad \text{para } t = t_n, \quad -\infty < r < r_j + \frac{\Delta r}{2} \\ (F, G, H) &= (F_{n_{j+1}}, G_{n_{j+1}}, H_{i_{n_{j+1}}}) \quad \text{para } t = t_n, \quad r_j + \frac{\Delta r}{2} < r < \infty \end{aligned} \quad (6.7)$$

Seja $\bar{F}_{n_j}, \bar{G}_{n_j}$ e $\bar{H}_{i_{n_j}}$ a solução generalizada das equações (6.6)-(6.7). Então, a

aproximação para a solução das equações (6.2)-(6.3) no tempo t_{n+1} é dada por:

$$\begin{aligned} F &= \hat{F}_{n+1}(r) \approx \bar{F}_{n_j}(r, t_{n+1}) \quad \text{para } r_j < r < r_{j+1} \\ G &= \hat{G}_{n+1}(r) \approx \bar{G}_{n_j}(r, t_{n+1}) \quad \text{para } r_j < r < r_{j+1} \\ H &= \hat{H}_{i_{n+1}}(r) \approx \bar{H}_{i_{n_j}}(r, t_{n+1}) \quad \text{para } r_j < r < r_{j+1} \end{aligned} \quad (6.8)$$

Após cada avanço no tempo, a solução obtida não mais representa uma função degrau. Assim sendo, uma nova escolha aleatória é necessária que permita construir a condição inicial na forma de uma função degrau para realizar a evolução no tempo de um dado instante t_n para o próximo instante t_{n+1} , empregando o método de Glimm.

Se a solução para um dado instante de tempo t_n for conhecida, os dados iniciais para o próximo degrau, t_{n+1} , são aproximados por:

$$\begin{aligned}
F_{j_n} &= F(r_j + \theta_n \Delta r, t_n) & \text{para } r_j - \frac{\Delta r}{2} < r < r_j + \frac{\Delta r}{2} \\
G_{j_n} &= G(r_j + \theta_n \Delta r, t_n) & \text{para } r_j - \frac{\Delta r}{2} < r < r_j + \frac{\Delta r}{2} \\
H_{i_n} &= H_i(r_j + \theta_n \Delta r, t_n) & \text{para } r_j - \frac{\Delta r}{2} < r < r_j + \frac{\Delta r}{2}
\end{aligned} \tag{6.9}$$

6.2. Técnica de Partição do Operador

6.2.1. Introdução

Os modelos matemáticos empregados em problemas que envolvem o escoamento de fluidos, em geral, originam sistemas de equações de convecção-difusão. Neste aspecto, quando tais modelos são usados em estudos qualitativos ou quantitativos, aproximações. Neste contexto, o esquema de partição do operador surge como uma ferramenta importante na sação destes modelos, permitindo separar efeitos originalmente concomitantes. Além disso, o tratamento mais conveniente de problemas não lineares não homogêneos hiperbólicos estudados no presente trabalho consiste em trabalhar separadamente com o problema homogêneo associado – a ser aproximado por um esquema de Glimm e a sua porção não homogênea.

A técnica de partição do operador consiste na decomposição do operador hiperbólico, de forma a separar a parte puramente hiperbólica – o problema homogêneo associado, da parte evolutiva no tempo, que dá origem a um sistema ordinário. O procedimento combinando a técnica de fatoração do operador (que leva em conta a porção não homogênea das equações diferenciais) ao método de Glimm

foi empregado com sucesso na simulação numérica de diversos problemas hiperbólicos não lineares.

Como exemplos, pode-se citar a propagação de ondas em fluidos, tratada por Sod [42], o escoamento de gases em dutos, analisado por Marchesin e Paes Leme [43], o enchimento de uma matriz porosa, estudado por Saldanha da Gama e Sampaio [44], a propagação de ondas em dutos viscoelásticos, modelada por Freitas Rachid et al [40], a resposta dinâmica de barras elásticas não lineares, estudada por Saldanha da Gama [39], o escoamento não isotérmico e isotérmico em meios porosos insaturados, analisado por Saldanha da Gama e Martins-Costa [45] e Martins-Costa et al [46].

6.2.2. Aproximação Numérica

Apartir de uma aproximação inicial construída com a aplicação do esquema de Glimm, a aproximação numérica para a solução no tempo $t = t_{n+1}$ é, então, obtida avançando-se no tempo com o mesmo passo de tempo Δt através do sistema puramente evolutivo no tempo.

Este procedimento – que consiste em alcançar uma aproximação para a solução (F, G, H_i) no tempo $t = t_{n+1}$, é repetido até que um determinado tempo de simulação previamente especificado seja alcançado. A aproximação numérica para a solução no instante de tempo $t = t_{n+1}$ é finalmente alcançada pelo avanço no tempo, resolvendo-se o seguinte problema, com o mesmo passo de tempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$, através das seguintes equações:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial t} &= -\frac{2}{r}G \\ \frac{\partial G}{\partial t} &= -\frac{2}{r}\frac{G^2}{F} \\ \frac{\partial H_i}{\partial t} &= -\frac{2}{r}\frac{GH_i}{F} - \alpha_i \frac{H_i}{F}, \quad i=1, m \end{aligned} \right\} \begin{aligned} F &= \hat{F}_{n+1}(r) \\ G &= \hat{G}_{n+1}(r) \\ H_i &= \hat{H}_{i_{n+1}}(r) \end{aligned} \quad \text{em } t = t_n \quad (6.10)$$

Assim, as aproximações são construídas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} F &= \hat{F}_{n+1}(r) \approx \tilde{F}_{n+1}(r) - \left\{ \frac{2}{r} \tilde{G}_{n+1}(r) \right\} \Delta t \\ G &= \hat{G}_{n+1}(r) \approx \tilde{G}_{n+1}(r) - \left\{ \frac{2}{r} \frac{[\tilde{G}_{n+1}(r)]^2}{\tilde{F}_{n+1}(r)} \right\} \Delta t \\ H_i &= \hat{H}_{i_{n+1}}(r) \approx \tilde{H}_{i_{n+1}}(r) - \left\{ \frac{2}{r} \frac{\tilde{G}_{n+1}(r) \tilde{H}_{i_{n+1}}(r)}{\tilde{F}_{n+1}(r)} + \alpha_i \frac{\tilde{H}_{i_{n+1}}(r)}{\tilde{F}_{n+1}(r)} \right\} \Delta t, \quad i=1, m \end{aligned} \quad (6.11)$$

sendo avaliados em $t = t_{n+1}$ e considerando $\Delta t = t_{n+1} - t_n$. Nas equações (6.11),

$(\tilde{F}, \tilde{G}, \tilde{H}_i)$ representa a aproximação inicial obtida através do esquema de Glimm para o problema homogêneo associado, definido pelas equações (6.2)-(6.3).

É interessante notar que a equação (6.10) considera uma casca esférica (equivalente a fazer $\beta=2$, no sistema de equações (2.45)), com raio interno R_i e raio externo R_e , que pode ser esquematizada como:

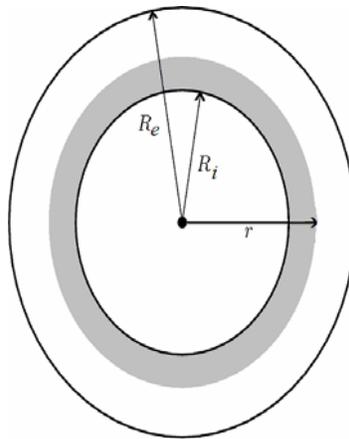


Figura 6.3 – Esquema de uma casca esférica.

Capítulo 7

Resultados Numéricos

Neste Capítulo iremos discutir os resultados obtidos na simulação de alguns exemplos realizados para avaliar o desempenho do aproximante de Riemann proposto neste trabalho em relação à solução exata do problema.

O modelo mecânico descrevendo o transporte de m poluentes na atmosfera é apresentado no sistema (2.39), onde $\beta = 0$ se o problema for descrito no sistema de coordenadas cartesianas, $\beta = 1$ no sistema cilíndrico de coordenadas e $\beta = 2$ no sistema de esférico coordenadas:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial r} = -\beta \frac{\rho v}{r} \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v^2 + p)}{\partial r} = -\beta \frac{\rho v^2}{r} \\ \frac{\partial(\rho \omega_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \omega_i v)}{\partial r} = -\beta \frac{\rho v \omega_i}{r} + r_i, \text{ onde } r_i = -\alpha_i \omega_i, i = 1, 2, \dots, m \end{cases} \quad (2.39)$$

7.1 Solução de um sistema não linear homogêneo com um único poluente

A fim de evidenciar o desempenho do aproximante de Riemann empregado neste trabalho, serão considerados inicialmente resultados obtidos através do método de Glimm, sem o esquema de partição do operador. O problema homogêneo associado à equação (2.39), pode ser obtido considerando algumas simplificações: o problema é descrito no sistema de coordenadas cartesianas, com o termo de geração nulo, $r_i = -\alpha_i \omega_i = 0$ e um único poluente, com concentração ω_1 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v^2 + p) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \omega_1 v) &= 0 \end{aligned} \quad (7.1)$$

Utilizando a seguinte adimensionalização:

$$\eta = \frac{x}{L} \quad \tau = \frac{t\tilde{v}}{L} \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\tilde{\rho}} \quad \tilde{v} = \frac{v}{\tilde{v}} \quad \tilde{p} = \frac{p}{\tilde{\rho}\tilde{v}^2} \quad (7.2)$$

onde L representa um comprimento de referência, \tilde{v} uma velocidade de referência e $\tilde{\rho}$ uma massa específica de referência e redefinindo convenientemente as variáveis como: $F \equiv \tilde{\rho}$, $G \equiv \tilde{\rho}\tilde{v}$, $H \equiv \tilde{\rho}\omega_1$ o problema pode ser expresso como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \tau} + \frac{\partial G}{\partial \eta} &= 0 \\ \frac{\partial G}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{G^2}{F} + \tilde{p}(F) \right) &= 0 \\ \frac{\partial H}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{GH}{F} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (7.3)$$

A solução do sistema (7.3), através da aplicação do esquema de Glimm, utilizando uma solução exata para o problema de Riemann associado, está representada pelas equações (6.2) a (6.9). O procedimento alternativo de solução do método de Glimm, utilizando o aproximante de Riemann, encontra-se descrito na seção 5.3, pelas equações (5.11) a (5.24).

As Figuras 7.1 e 7.2 mostram a evolução da densidade mássica do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume para cinco diferentes instantes de tempo, possibilitando observar a boa performance do aproximante proposto. Aqui, o eixo das ordenadas apresenta o valor numérico assumido por cada uma das três variáveis consideradas (ρ , v e $\rho\omega_1$), enquanto o eixo das abscissas representa a coordenada espacial η .

Nos resultados qualitativos mostrados nas Figuras 7.1 e 7.2, foi empregada uma normalização conveniente onde os valores máximos e mínimos das variáveis ρ , v e $\rho\omega_i$ correspondem respectivamente a um e zero nos gráficos, conforme indicado abaixo

$$\frac{\rho - (\rho)_{\min}}{(\rho)_{\max} - (\rho)_{\min}} \rightarrow \rho \quad ; \quad \frac{v - (v)_{\min}}{(v)_{\max} - (v)_{\min}} \rightarrow v ;$$

$$\frac{\rho\omega_{i=1,m} - (\rho\omega_{i=1,m})_{\min}}{(\rho\omega_{i=1,m})_{\max} - (\rho\omega_{i=1,m})_{\min}} \rightarrow \rho\omega_i \quad i = 1, m$$
(7.4)

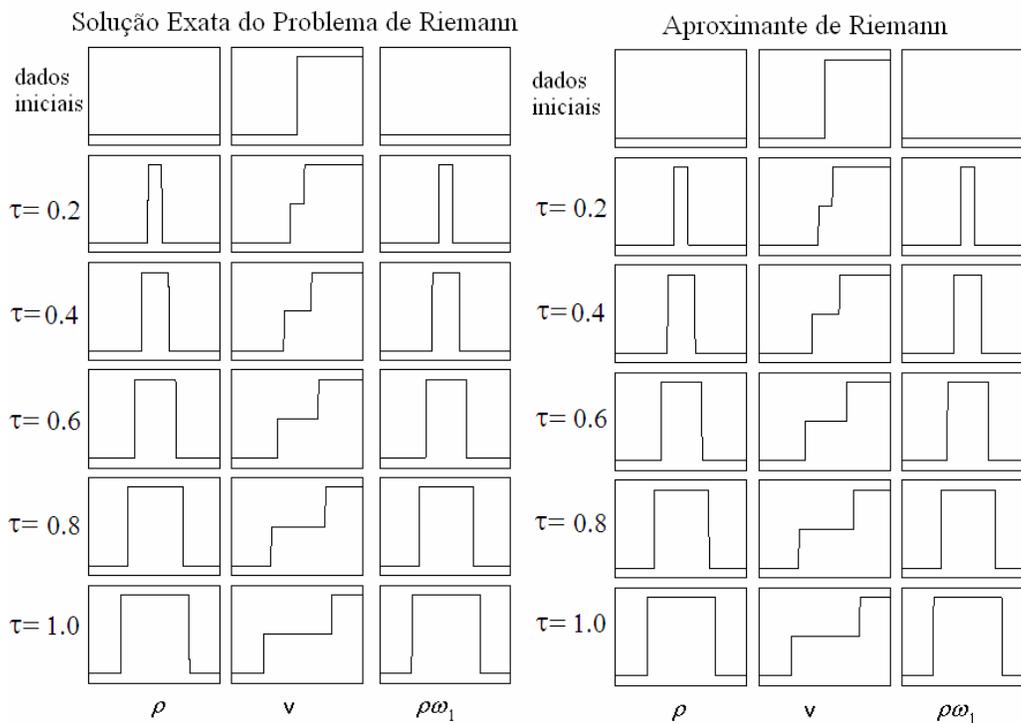


Figura 7.1 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume com a posição. – Dados iniciais: ρ e ω_1 constantes e função degrau para v .

É importante observar que tanto ρ como ω_1 não assumem valores negativos.

Em todos os resultados é considerado um domínio ilimitado ($-\infty < \eta < \infty$), para os diferentes dados iniciais.

Os resultados são apresentados em duas colunas – identificadas por “Solução Exata do Problema de Riemann” e “Aproximante de Riemann”. No lado esquerdo

temos um conjunto formado por três colunas e seis linhas de gráficos, onde cada linha representa um instante de tempo distinto, sendo o primeiro imposto pela condição inicial. Neste conjunto, os valores de ρ , v e $\rho\omega_1$ foram obtidos através do emprego do método de Glimm com 300 passos para cada avanço de tempo, construído utilizando a solução exata do problema de Riemann associado. As três colunas do lado direito mostram resultados equivalentes para ρ , v e $\rho\omega_1$, também obtidos pelo emprego do método de Glimm, com o mesmo número de passos, porém, construído com o aproximante de Riemann proposto neste trabalho.

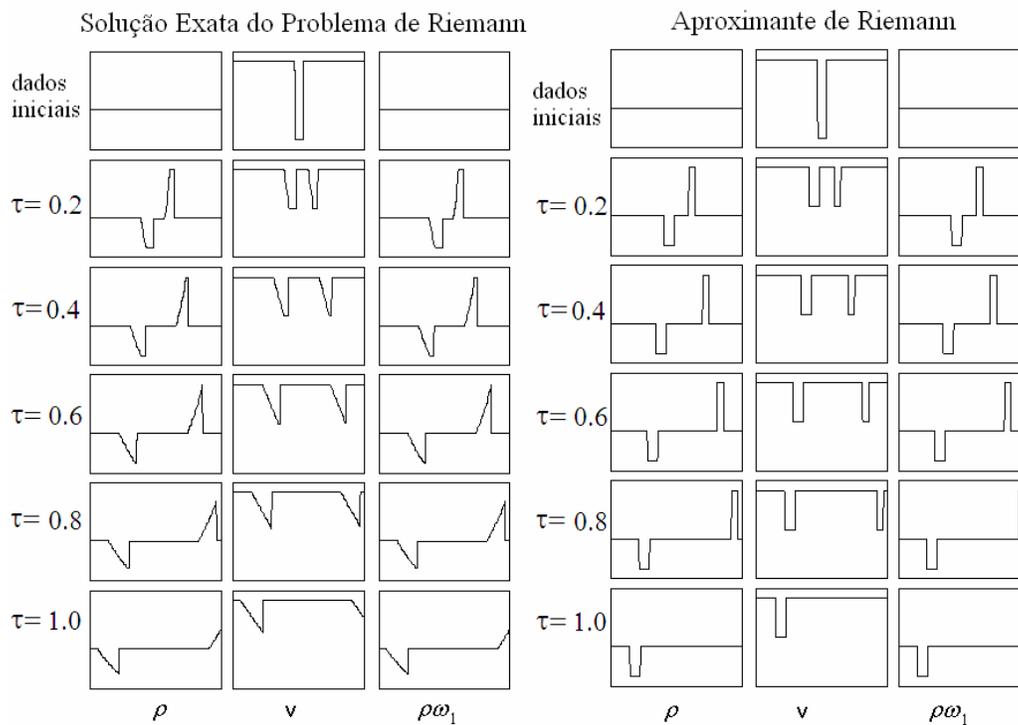


Figura 7.2 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume com a posição. – Dados iniciais: ρ e ω_1 constantes e velocidade constante na maior parte do domínio, exceto por uma pequena região com baixa velocidade.

Na figura 7.1 os dados iniciais consistem de um choque prescrito para a velocidade enquanto valores constantes são prescritos tanto para a massa específica como para a concentração do poluente na mistura. Como os resultados obtidos através da solução exata do problema de Riemann – exibidos pelas três primeiras colunas – mostram essencialmente conexões por choques, a concordância com a aplicação do esquema de Glimm, obtido através do aproximante proposto – mostrado nas três últimas colunas, é muito boa, comprovando o bom desempenho do aproximante.

A figura 7.2 foi obtida considerando-se como dados iniciais um valor constante (unitário) para a massa específica e um valor constante para a concentração do poluente ($\omega_1 = 0.5$). Uma região muito pequena de baixa velocidade ($v = -1.0$) foi imposta próximo ao centro do domínio, enquanto que, fora desta região, foi imposto um valor maior para a velocidade ($v = 0$). Comparando-se a solução exata com aquela obtida através do emprego do aproximante de Riemann, pode-se observar o bom desempenho deste último, com choques na mesma posição espacial em ambos os casos. Conforme esperado, o aproximante, cuja filosofia consiste em utilizar sempre conexões por soluções descontínuas, não é capaz de capturar exatamente as conexões por rarefação, obtidas na solução exata.

7.2 Solução de um sistema não linear não homogêneo com m poluentes

Neste item a solução através do método de Glimm com o aproximante de Riemann é comparada com a solução pelo método de Glimm utilizando a solução exata do problema de Riemann associado. Considera-se uma casca esférica – o problema descrito na equação (2.39) usará um sistema esférico de coordenadas ($\beta = 2$). Além disso, o termo de geração $r_i = -\alpha_i \omega_i$, considerando α_i uma constante sempre positiva, é levado em conta e consideram-se três diferentes poluentes – denotados por constituintes 1,2, e 3, presentes na mistura, cujas concentrações, por unidade de volume, são dadas, respectivamente, por $\rho\omega_1, \rho\omega_2$ e $\rho\omega_3$.

Utilizando a seguinte adimensionalização:

$$\eta = \frac{r}{R}, \quad \tau = \frac{t\tilde{v}}{R}, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\tilde{\rho}}, \quad \tilde{v} = \frac{v}{\tilde{v}}, \quad \tilde{p} = \frac{p}{\tilde{\rho}\tilde{v}^2} \quad (7.5)$$

onde R representa um raio de referência, \tilde{v} uma velocidade de referência e $\tilde{\rho}$ uma massa específica de referência e fazendo uma redefinição conveniente de variáveis:

$F \equiv \tilde{\rho}, G \equiv \tilde{\rho}\tilde{v}, H_i \equiv \tilde{\rho}\omega_i$, o problema (2.39) pode ser expresso como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \tau} + \frac{\partial G}{\partial \eta} &= -\frac{2}{r}G \\ \frac{\partial G}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{G^2}{F} + \tilde{p} \right) &= -\frac{2}{r} \frac{G^2}{F} \\ \frac{\partial H_i}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{GH_i}{F} \right) &= -\frac{2}{r} \frac{GH_i}{F} - \alpha_i \frac{H_i}{F}, \quad i = 1, m \end{aligned} \quad (7.6)$$

A solução exata do sistema (7.6) está apresentada no capítulo 6. Na seção 6.1 é descrito o esquema de Glimm – equações (6.2) a (6.9), enquanto que a seção 6.2 descreve a técnica de partição do operador – equações (6.10) e (6.11). O procedimento alternativo de solução do método de Glimm, utilizando o aproximante de Riemann, encontra-se descrito na seção 5.3, pelas equações (5.11) a (5.24).

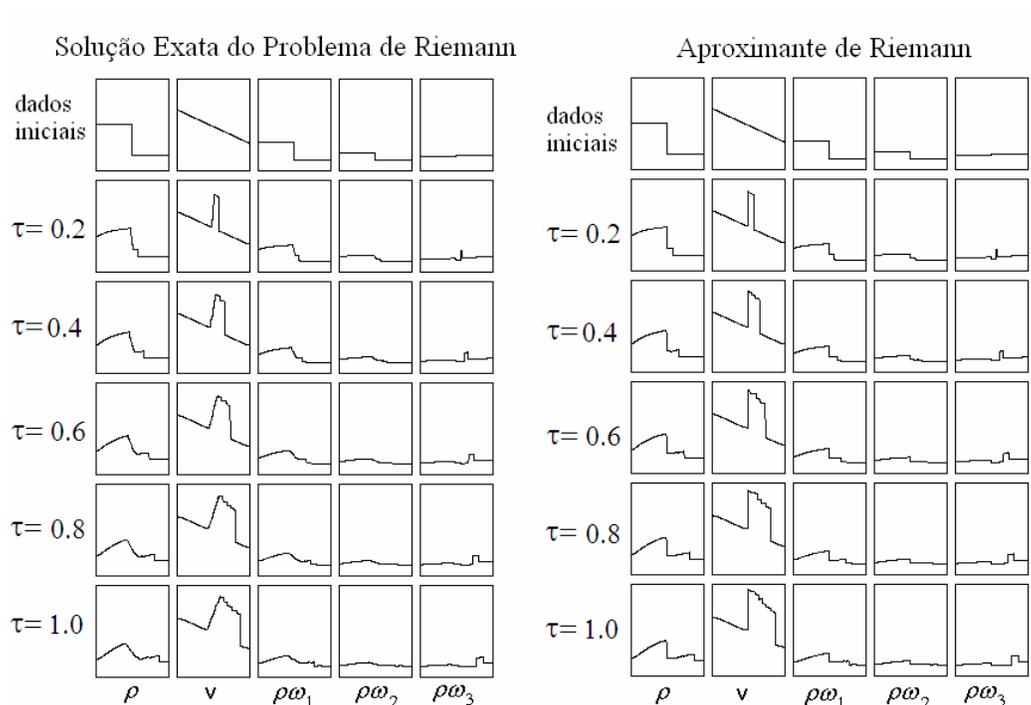


Figura 7.3 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes por unidade de volume ($\rho\omega_i, i=1,2,3$) com a posição radial. – Dados iniciais: funções degrau para ρ , ω_1 , ω_2 e ω_3 e função linear decrescente para v .

As Figuras 7.3, 7.5, 7.7 e 7.9 mostram os resultados – utilizando a solução exata do problema de Riemann e o aproximante de Riemann – para a massa específica do gás, a velocidade e a concentração dos três poluentes por unidade de volume ($\rho\omega_i$,

$\rho\omega_2$ e $\rho\omega_3$). Estes resultados são mostrados empregando-se a normalização descrita pela equação (7.4).

Analogamente ao problema descrito no item anterior, cada caso considerado é apresentado num conjunto de gráficos com seis linhas e cinco colunas, onde cada linha denota um instante diferente de tempo – a condição inicial e a evolução das cinco variáveis em cinco diferentes instantes de tempo – e cada coluna mostra a variação da densidade do gás, da velocidade e das concentrações $\rho\omega_1$, $\rho\omega_2$ e $\rho\omega_3$, ao longo da posição radial, sendo o raio interno representado à esquerda e o raio externo à direita. Como no problema analisado nas figuras 7.1 e 7.2, verifica-se o bom desempenho do aproximante proposto. Em todos os casos analisados, considerou-se um processo isotérmico e a taxa de produção $\alpha_1 = 0.1$ para o primeiro constituinte e uma taxa de produção nula para o segundo e o terceiro constituintes ($\alpha_2 = \alpha_3 = 0$).

Na figura 7.3 foram considerados como dados iniciais funções degrau tanto para as concentrações dos poluentes como para a massa específica do ar e uma função linear decrescente para a velocidade.

Nas figuras 7.4, 7.6, 7.8 e 7.10 são exibidas as representações espaço-temporais referentes às figuras 7.3, 7.5, 7.7 e 7.9, respectivamente. Estas superfícies permitem uma visão global da evolução temporal para as três variáveis consideradas – ρ , v e $\rho\omega_1$ – onde se observa uma concordância entre os resultados alcançados pela solução exata e o aproximante de Riemann. A escolha da superfície mostrando a concentração por unidade de volume do poluente 1 ($\rho\omega_1$) foi devido ao fato de ter-se considerado para os outros dois poluentes $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$.

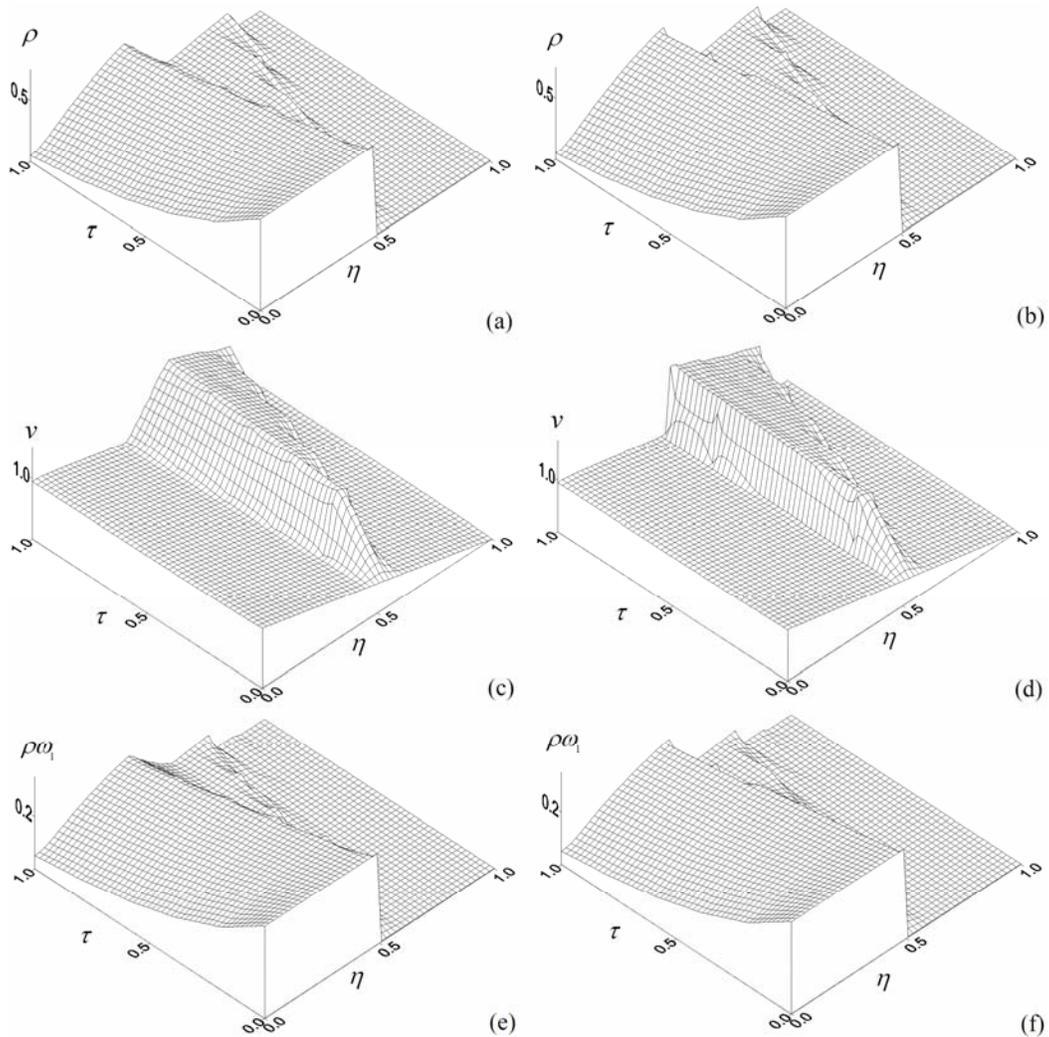


Figura 7.4 – Superfícies de densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume ($\rho\omega_1$), referentes à Figura 7.3 – (a), (c), (e): Solução exata do problema de Riemann; (b), (d), (f): Aproximante de Riemann.

Na figura 7.4 observa-se, nos casos (c) e (d), representando o comportamento da velocidade obtido através dos dois procedimentos anteriormente descritos, que o aproximante de Riemann empregado na obtenção da Figura 7.4 (d) foi incapaz de capturar a conexão suave apresentada da Figura 7.4 (c), obtida através da solução exata do problema de Riemann associado.

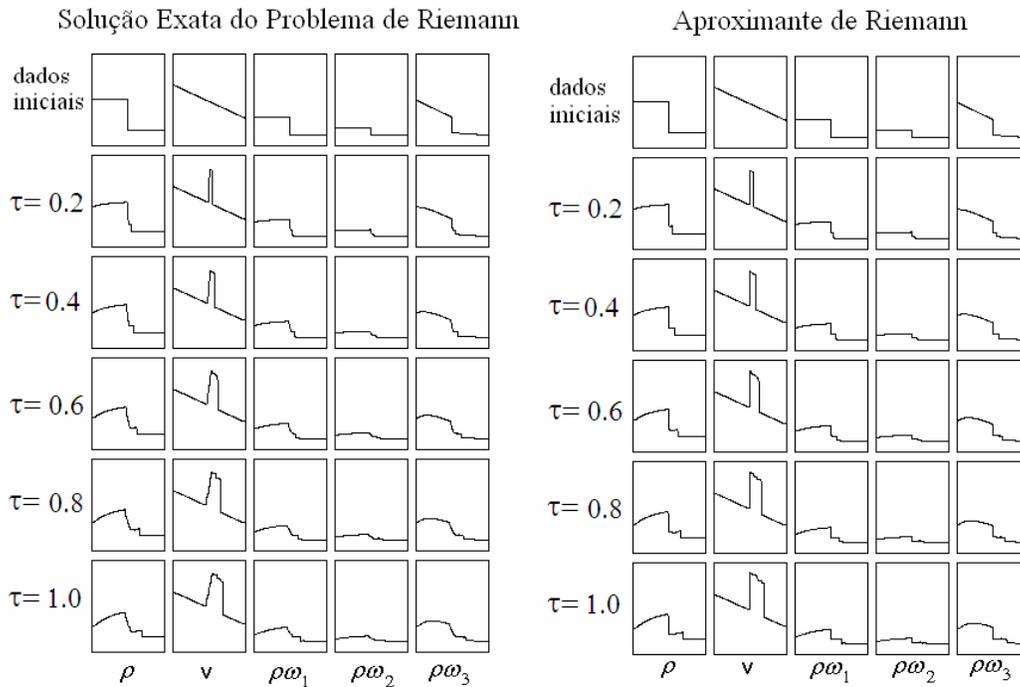


Figura 7.5 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes por unidade de volume ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial. – Dados iniciais: funções degrau para ρ , ω_1 e ω_2 e funções lineares para ω_3 e para v .

Na figura 7.5 foram consideradas as mesmas condições iniciais empregadas na figura 7.3, exceto para o terceiro constituinte cuja concentração é uma função linear decrescente. Como nos casos anteriores, foi verificada boa concordância entre os problemas apresentados pelos conjuntos de gráficos à esquerda e à direita, com a evolução da velocidade mostrando pequenas diferenças, quando uma conexão por rarefação foi utilizada na obtenção da solução exata. Os mesmos comentários se aplicam às superfícies apresentadas na figura 7.6.

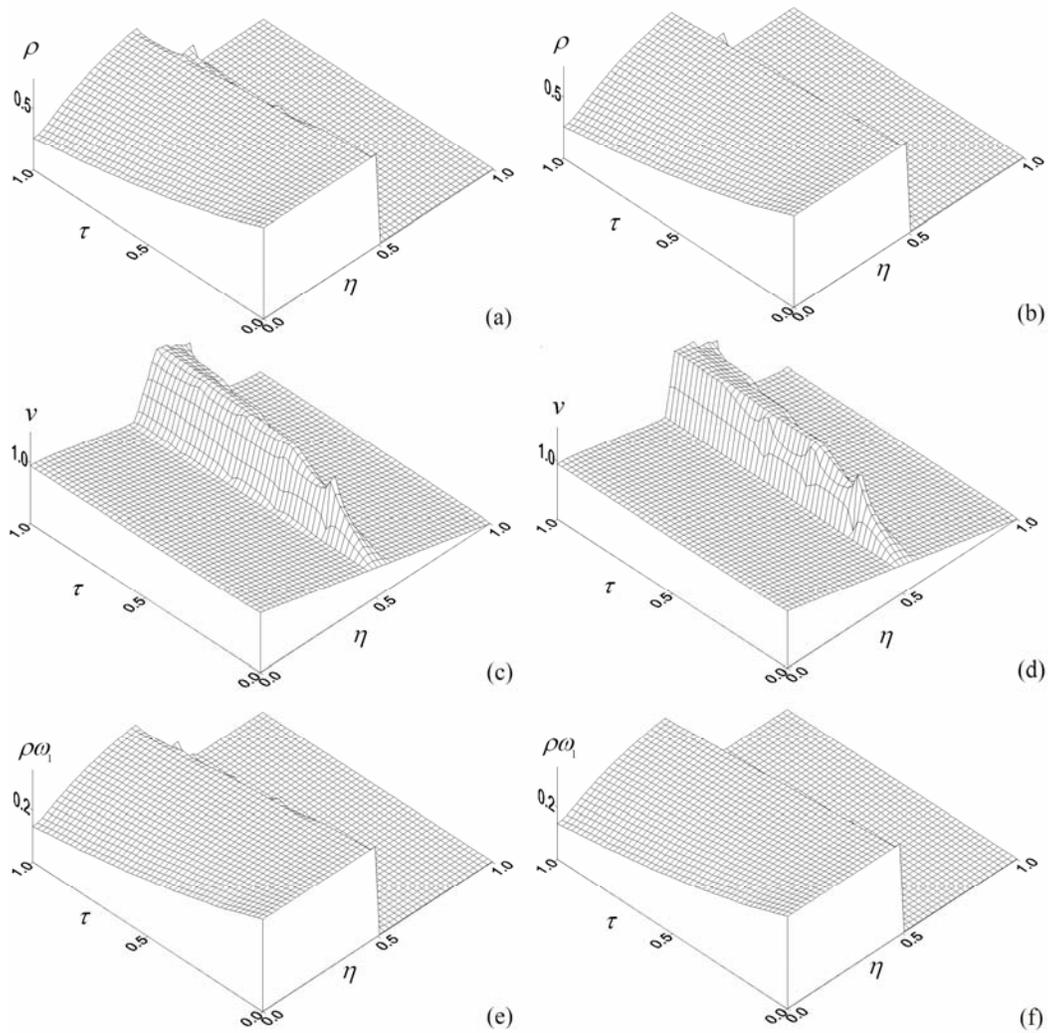


Figura 7.6 – Superfícies de densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume ($\rho\omega_1$), referentes à Figura 7.5 – (a), (c), (e): Solução exata do problema de Riemann; (b), (d), (f): Aproximante de Riemann.

É importante observar que as figuras 7.5 e 7.6 foram obtidas considerando-se o dobro do número de evoluções no tempo empregadas na obtenção das figuras 7.3 e 7.4. Nas figuras 7.3 e 7.4 entre cada um dos instantes plotados foram considerados 400 avanços no tempo, enquanto as figuras 7.5 e 7.6 foram obtidas utilizando 200 avanços no tempo entre cada um dos instantes de tempo mostrados.

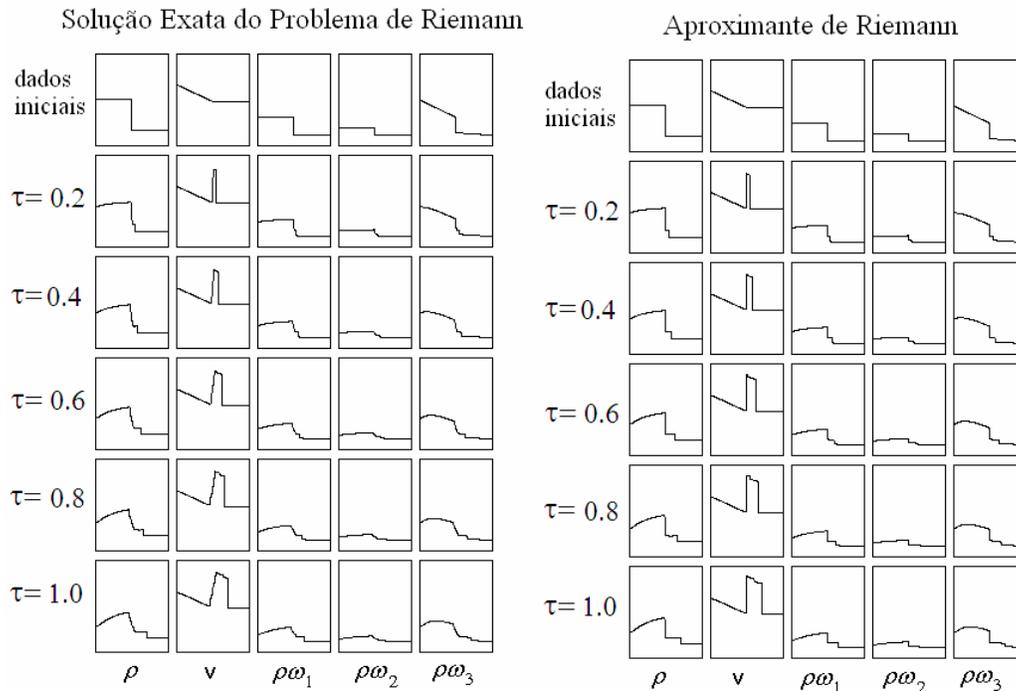


Figura 7.7 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes por unidade de volume ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial. – Dados iniciais: funções degrau para ρ , ω_1 e ω_2 ; função linear para ω_3 e função linear e constante para v .

Nas figuras 7.7 e 7.8 foram prescritas funções degrau para a concentração dos constituintes 1 e 2, e uma função linear decrescente para o constituinte 3, enquanto que, para a velocidade, foi suposta uma função linear decrescente até a linha de centro da casca esférica e, a partir desta região, foi suposto um valor constante.

Comparando a evolução da velocidade apresentada na figuras 7.5 e 7.7 (ambas considerando 200 avanços no tempo entre cada um dos instantes de tempo mostrados), foram observadas conexões suaves para a solução exata tanto do lado esquerdo quanto do lado direito da figura 7.5, enquanto na figura 7.7 as conexões suaves para a solução exata foram observadas apenas do lado esquerdo – no lado direito foi verificada uma aparente coincidência com os resultados obtidos pelo

aproximante de Riemann. As figuras 7.6(c) e 7.8(c) confirmam estas observações, no que se refere às conexões suaves ao lado esquerdo, mas são incapazes de mostrar as diferenças do lado direito, devido à perspectiva adotada para plotar as superfícies. Além disso, a influência de valores iniciais distintos para ω_3 – impostos para a obtenção das figuras 7.5 e 7.7, tiveram influência muito pequena na evolução de $\rho\omega_3$.

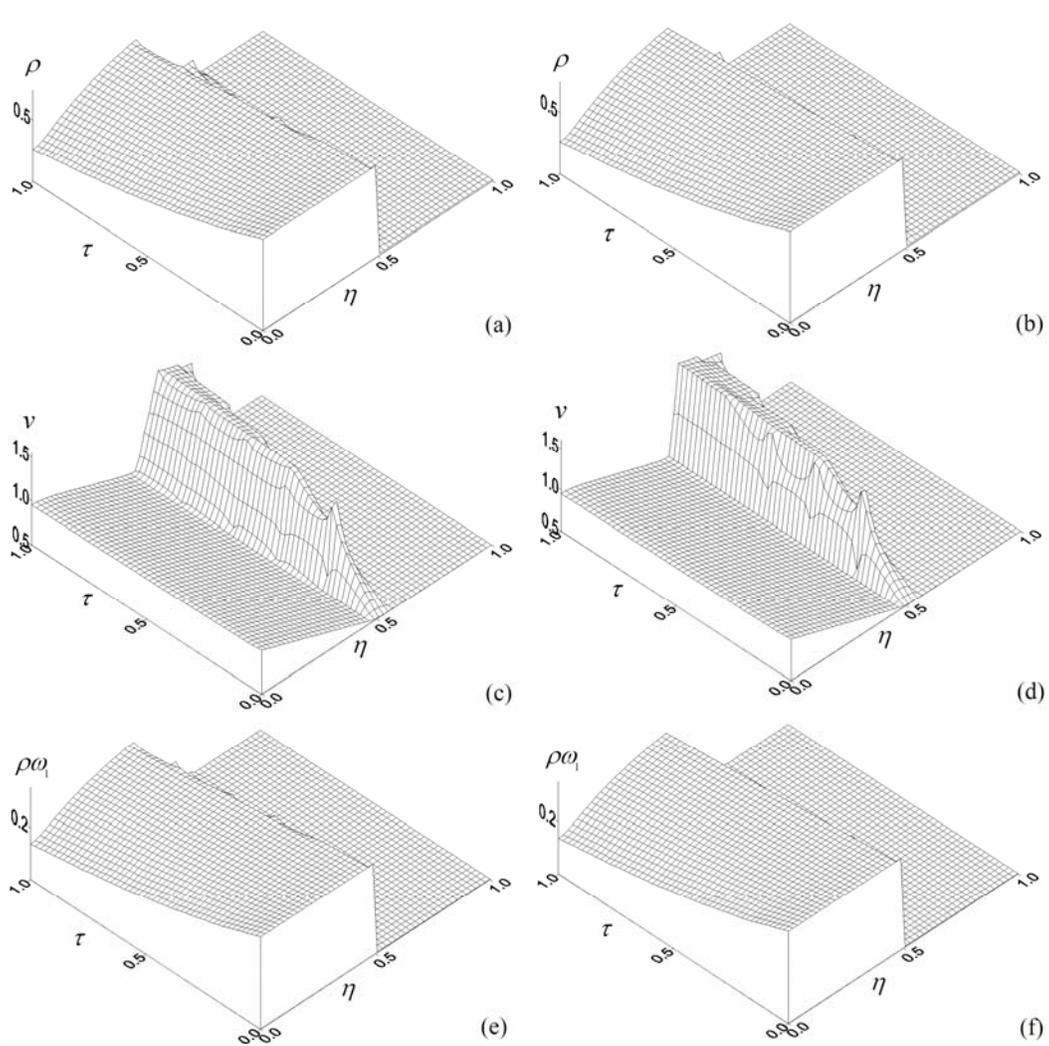


Figura 7.8 – Superfícies de densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume ($\rho\omega_1$), referentes à Figura 7.7 – (a), (c), (e): Solução exata do problema de Riemann; (b), (d), (f): Aproximante de Riemann.

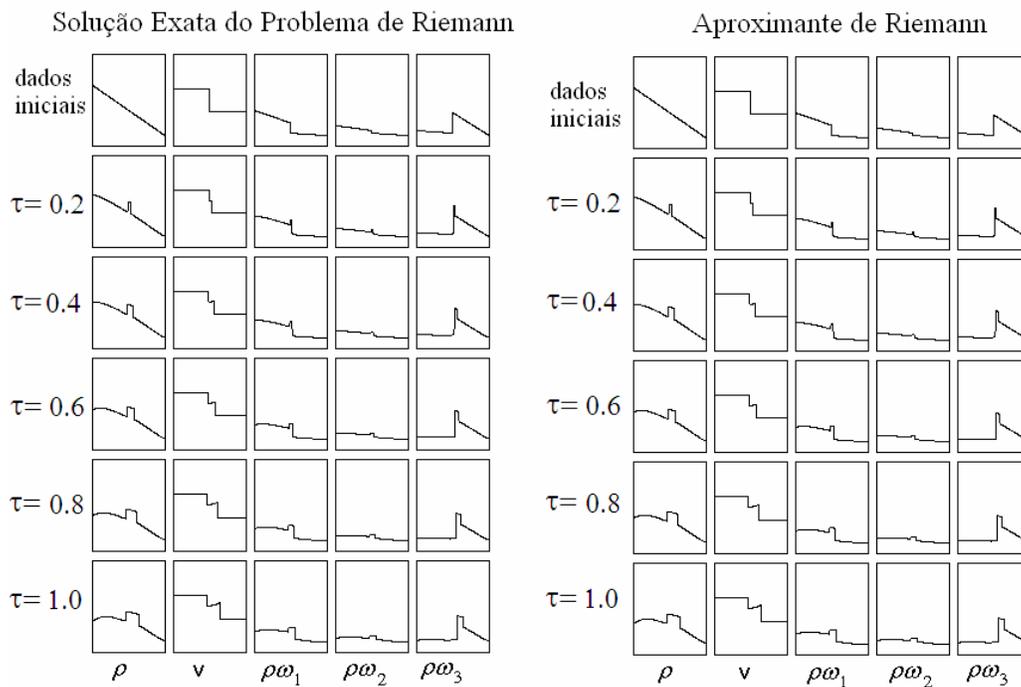


Figura 7.9 – Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes por unidade de volume ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial. – Dados iniciais: funções degrau para v , ω_1 , ω_2 e ω_3 e função linear para ρ ,

Finalmente, nas figuras 7.9 e 7.10, foram prescritas funções degrau para todas as concentrações dos poluentes e para a velocidade enquanto uma função linear decrescente foi utilizada como condição inicial para a densidade. A função linear decrescente escolhida resultou em diferenças pouco perceptíveis entre as aproximações numéricas obtidas empregando-se a solução exata do problema de Riemann e o aproximante de Riemann, tanto nos cinco instantes de tempo mostrados na figura 7.9 quanto nas superfícies apresentadas na figura 7.10.

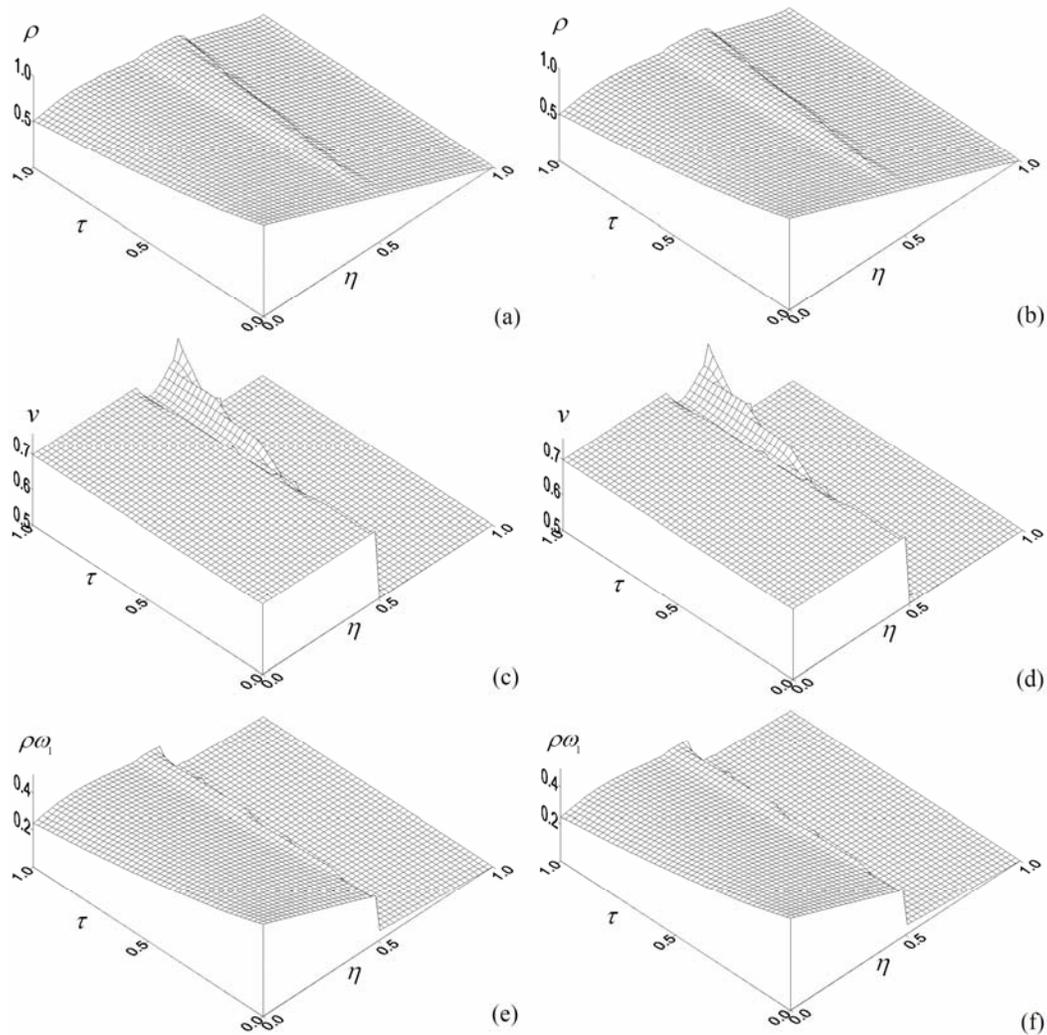


Figura 7.10 – Densidade do gás, velocidade e concentração do poluente por unidade de volume ($\rho\omega_1$) como função do tempo e da posição radial, referentes à Figura 7.9 – (a), (c), (e): Solução exata do problema de Riemann; (b), (d), (f): Aproximante de Riemann.

Os resultados numéricos apresentados nas Figuras 7.3 a 7.10 foram obtidos através de uma combinação do esquema de diferenças de Glimm com uma técnica de fatoração do operador descritos no capítulo 6, enquanto aqueles apresentados nas figuras 7.1 e 7.2, representados pelo sistema homogêneo descrito pelas equações (7.1)-(7.3), não empregaram a fatoração do operador. Entre cada dois instantes de

tempo mostrados foram empregadas 200 avanços evoluções no tempo (exceto no caso apresentado pelas Figuras 7.3 e 7.4, onde foram usadas 400 avanços no tempo). Já no domínio espacial, foram utilizados 300 passos, em todos os casos ilustrados pelas figuras 7.1 a 7.10. Uma observação importante deve ser feita em relação aos passos de tempo – um número relativamente pequeno de passos de tempo (300 passos), empregado para a maioria dos casos considerados, permitiu obter uma rápida convergência em ambos os procedimentos: a solução exata do problema de Riemann e o aproximante de Riemann.

É importante destacar aqui que, para todas as simulações realizadas, os resultados alcançados, tanto para a solução exata como para o aproximante proposto, mostraram uma boa concordância, justificando, desta forma, o emprego do procedimento alternativo na simulação de sistemas hiperbólicos não lineares.

Como nos resultados obtidos empregando a solução exata do problema de Riemann – apresentados na figuras 7.3, 7.5, 7.7 e 7.9, a maioria das conexões entre os estados ocorre por choques, o aproximante de Riemann empregado neste trabalho (apresentado nas cinco colunas à direita) apresenta uma concordância muito boa com aqueles obtidos através da solução exata do problema de Riemann. Nos casos observados, a concordância não é tão boa apenas quando as condições iniciais são do tipo funções lineares. Embora os choques estejam sempre na mesma posição espacial em ambos os procedimentos empregados para tratar o problema de Riemann, o procedimento usando o aproximante de Riemann não foi capaz de representar as conexões suaves obtidas através da solução exata do problema de Riemann, devido à filosofia do aproximante de Riemann, que consiste em substituir tanto soluções contínuas como descontínuas por choques.

7.3 Sistema não linear não homogêneo com 3 poluentes considerando variação dos parâmetros

Neste item serão consideradas as influências do raio de curvatura da casca esférica e da taxa de destruição ou produção do poluente 1 (α), considerando diferentes condições iniciais e diferentes valores para o raio interno e para o parâmetro α . Todos os resultados apresentados neste item, que comparam a simulação do problema de Glimm – implementado via solução exata do problema de Riemann associado e através do aproximante de Riemann anteriormente descrito – utilizando um esquema de fatoração do operador, foram normalizados pela equação (7.4).

A curvatura é variada, considerando-se uma espessura unitária para a casca esférica e o raio interno $R_i = 0.05$ e $R_i = 2.05$ e a taxa de destruição do poluente 1 (dada pela relação $r_1 = -\alpha\omega_1$, num modelo preliminar para reações químicas, que alterariam a quantidade do poluente) é variada fazendo a constante α assumir os valores $\alpha = 0.8$ e $\alpha = 0.2$. As condições iniciais para os cinco casos apresentados são detalhadas a seguir.

Como nos itens anteriores, o domínio espacial foi discretizado utilizando-se 300 passos e entre cada dois instantes de tempo mostrados foram empregadas 200 avanços no tempo. Vale a pena observar mais uma vez que foi obtida rápida convergência (300 passos de tempo), em ambas as metodologias utilizadas para implementar o método de Glimm.

No Caso I a condição inicial é uma função linear decrescente para a velocidade, ($v_0 = (N - I + 1) / N$) enquanto funções degrau, que assumem um valor à esquerda do raio de curvatura médio e um outro valor à direita do raio de curvatura

médias são empregadas para a massa específica ($\rho_{0_E} = 0.7, \rho_{0_D} = 0.1$) e para as concentrações as funções degrau são dadas por ($\omega_{01_E} = 0.5, \omega_{01_D} = 0.1$), ($\omega_{02_E} = 0.2, \omega_{02_D} = 0.1$) e ($\omega_{03_E} = 0.1, \omega_{03_D} = 0.9$).

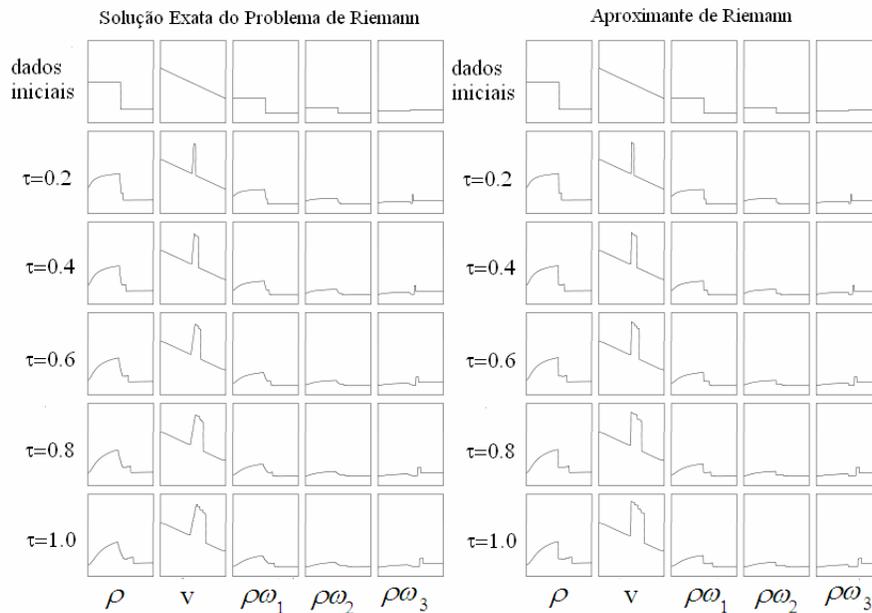


Figura 7.11 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i, i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.8$. Dados iniciais: Caso I.

Na figura 7.11 é plotada a variação da densidade do gás, da velocidade e da concentração dos poluentes por unidade de volume ($\rho\omega_i, i=1,2,3$) com a posição radial, considerando a solução exata do problema de Riemann e o aproximante de Riemann, para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.8$; enquanto a figura 7.12 considera $R_i=2.05$ e $\alpha=0.8$. Comparando as duas figuras, pode-se observar a influência do raio de curvatura, cujo aumento diminui a curvatura da densidade próximo da superfície interna da casca esférica, carregando esta influência para $\rho\omega_1, \rho\omega_2$ e $\rho\omega_3$. Quanto à velocidade, observa-se um comportamento mais uniforme no salto.

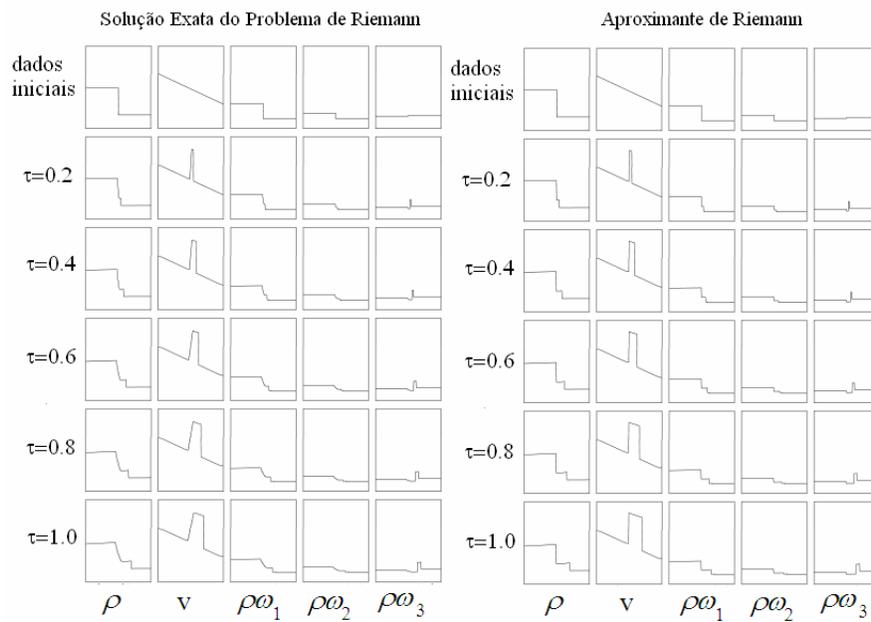


Figura 7.12 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=2.05$ e $\alpha=0.8$. Dados iniciais: Caso I.

As figuras 7.13 e 7.14 são plotadas para os mesmos parâmetros que figuras 7.11 e 7.12, ou seja $R_i=0.05$ e $R_i=2.05$, respectivamente, mas considerando $\alpha=0.2$. A influência da taxa de destruição ou produção do poluente 1 pode ser observada comparando as figuras 7.11 e 7.13 e 7.12 e 7.14. Na verdade, esta comparação não mostra alteração com o parâmetro α . Já a comparação entre as figuras 7.13 e 7.14 confirma as observações anteriores sobre a influência do raio de curvatura.

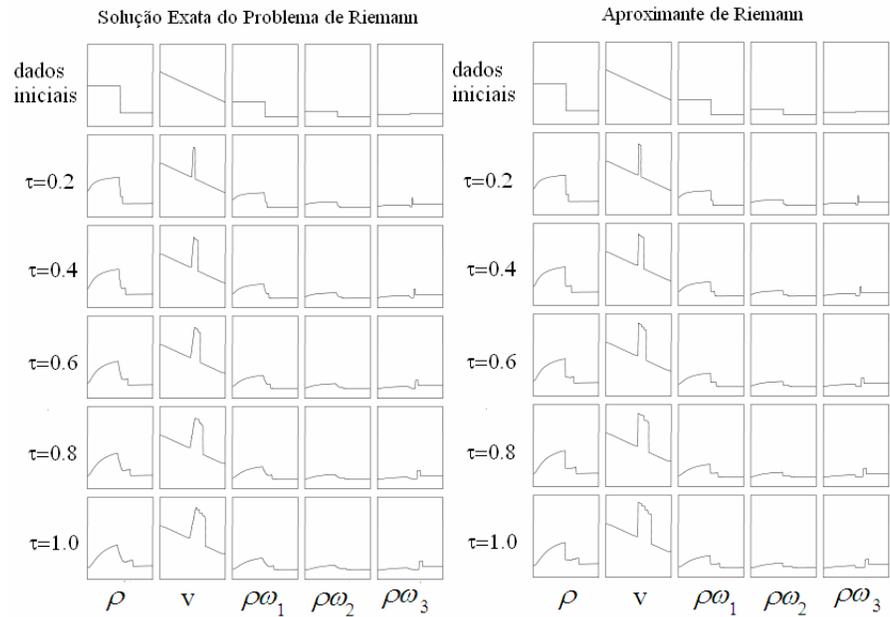


Figura 7.13 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes

($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.2$. Dados iniciais: Caso I.

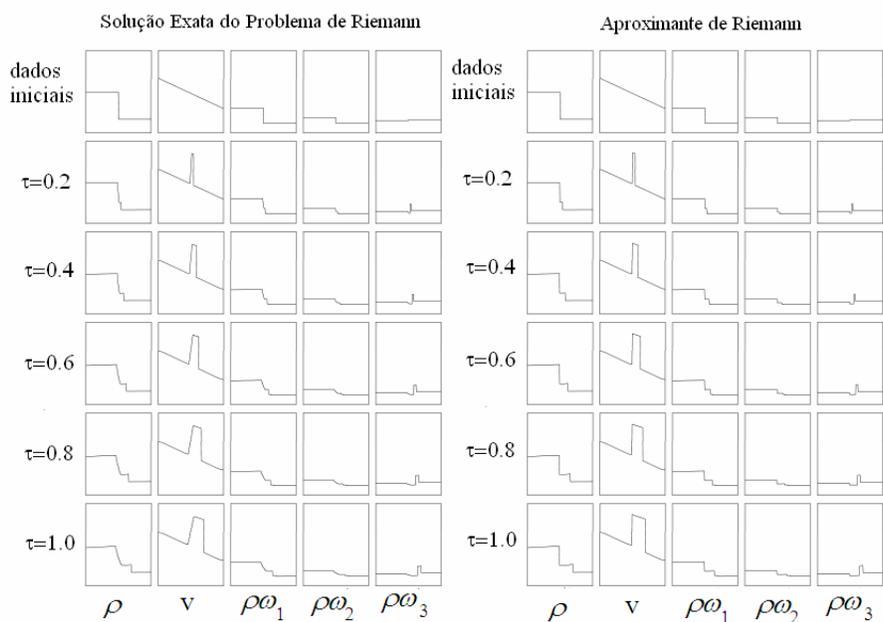


Figura 7.14 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes

($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=2.05$ e $\alpha=0.2$. Dados iniciais: Caso I.

No Caso II são consideradas funções degrau, que assumem um valor à esquerda do raio de curvatura médio e um outro valor à direita do raio de curvatura médio são empregadas para a velocidade ($v_{0_E} = 1.0, v_{0_D} = 0.0$), para a massa específica ($\rho_{0_E} = 0.9, \rho_{0_D} = 0.1$) e para as concentrações dos poluentes 2 e 3 ($\omega_{0_{2_E}} = 0.1, \omega_{0_{2_D}} = 0.9$) e ($\omega_{0_{3_E}} = 0.9, \omega_{0_{3_D}} = 0.1$), enquanto a concentração do poluente 1 é suposta constante ($\omega_{0_1} = 0.5$).

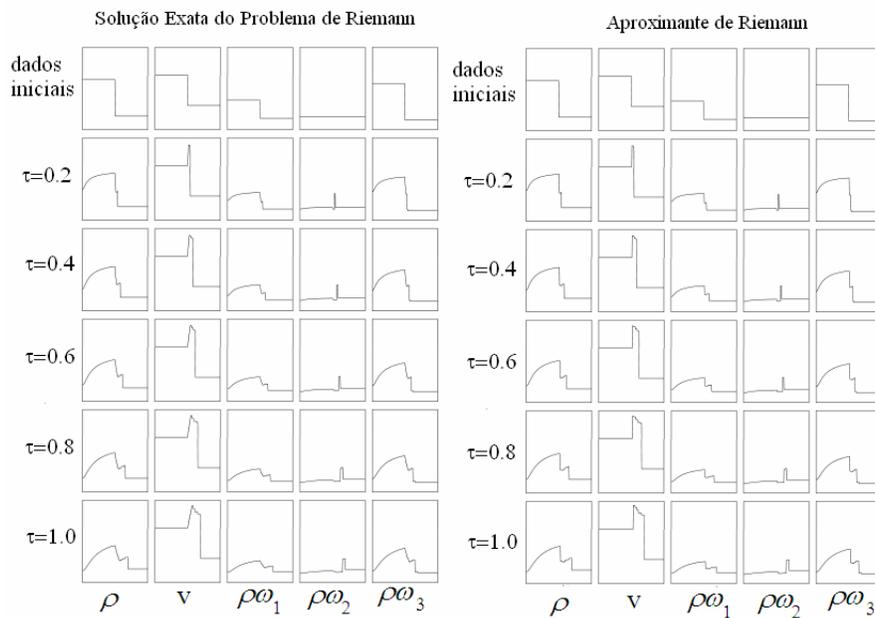


Figura 7.15 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i, i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.8$. Dados iniciais: Caso II.

Na figura 7.15 tem-se a variação de v, ρ e $\rho\omega_i, i=1,2,3$, considerando soluções exata e aproximada do problema de Riemann, para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.8$; enquanto a figura 7.16 considera $R_i=2.05$ e $\alpha=0.8$. A influência raio de curvatura é menor que no caso anterior, cujo aumento diminui a curvatura da densidade próximo da superfície interna da casca esférica, carregando esta influência para $\rho\omega_1, \rho\omega_2$ e $\rho\omega_3$. e torna o comportamento da velocidade mais uniforme no salto.

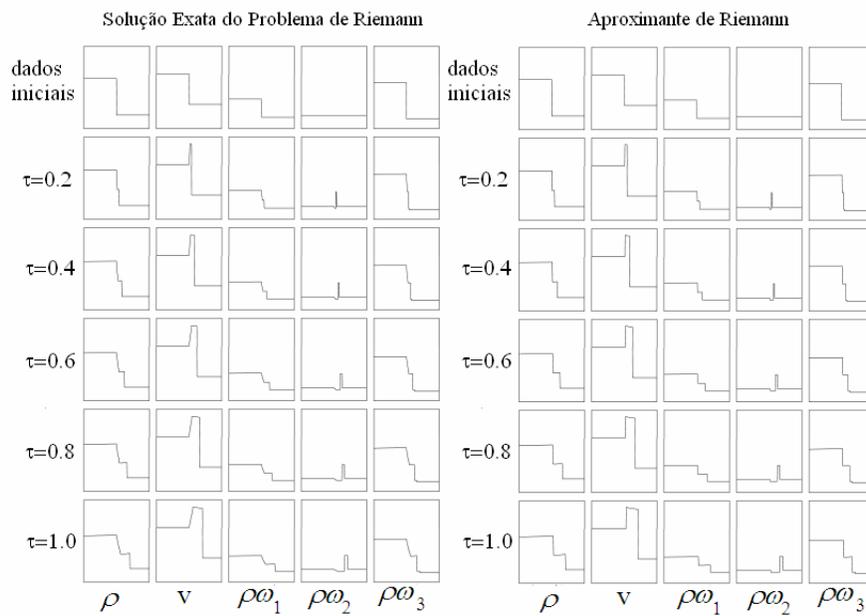


Figura 7.16 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=2.05$ e $\alpha=0.8$. Dados iniciais: Caso II.

As figuras 7.17 e 7.18 são plotadas para os mesmos parâmetros que figuras 7.15 e 7.16, ou seja $R_i=0.05$ e $R_i=2.05$, respectivamente, mas considerando $\alpha=0.2$. A influência da taxa de destruição do poluente 1 pode ser observada comparando as figuras 7.15 e 7.17 e as figuras 7.16 e 7.18. Analogamente ao caso I, não se observa alteração de comportamento da densidade ou da concentração dos poluentes com o parâmetro α , enquanto a influência do raio de curvatura (observada pela comparação entre as figuras 7.15 e 7.16 e as figuras 7.17 e 7.18) confirma as observações anteriores.

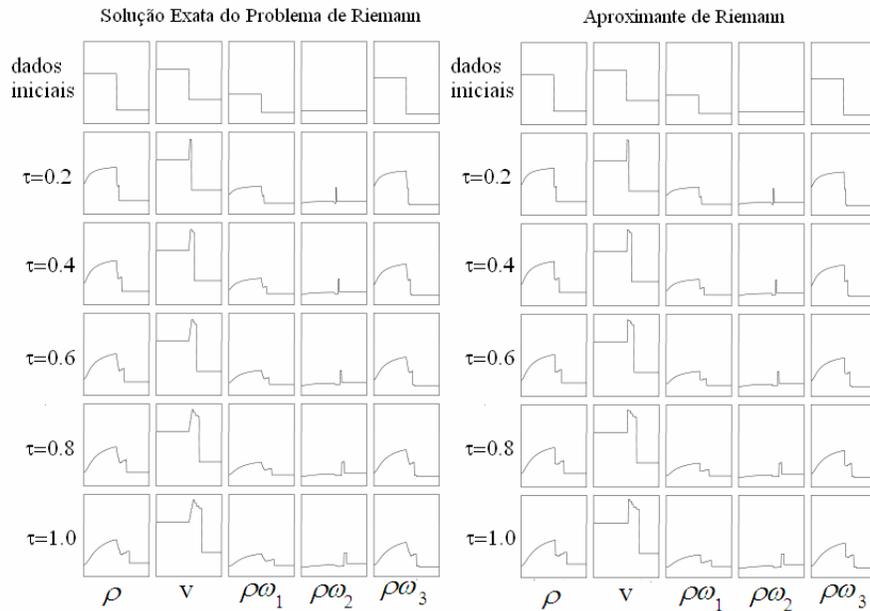


Figura 7.17 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.2$. Dados iniciais: Caso II.

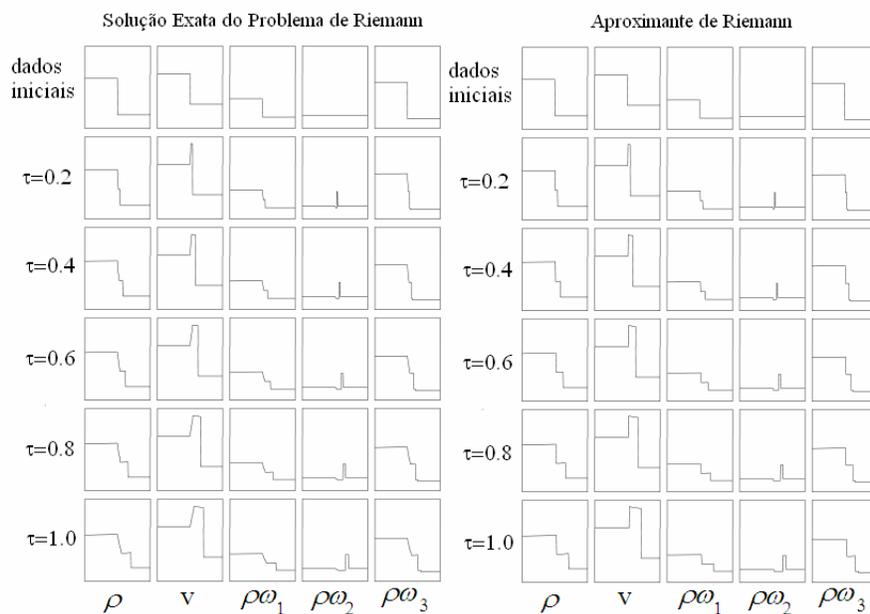


Figura 7.18 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=2.05$ e $\alpha=0.2$. Dados iniciais: Caso II.

No Caso III são consideradas as mesmas concentrações dos poluentes utilizadas no Caso II: funções degrau $\omega_{02_E} = 0.1$, $\omega_{02_D} = 0.9$ e $\omega_{03_E} = 0.9$, $\omega_{03_D} = 0.1$ e $\omega_{01} = 0.5$, enquanto os valores assumidos à esquerda e à direita do raio de curvatura médio são invertidos, ou seja: a velocidade inicial é dada por $v_{0_E} = 0.0$, $v_{0_D} = 1.0$ enquanto a massa específica inicial obedece a $\rho_{0_E} = 0.1$, $\rho_{0_D} = 0.9$.

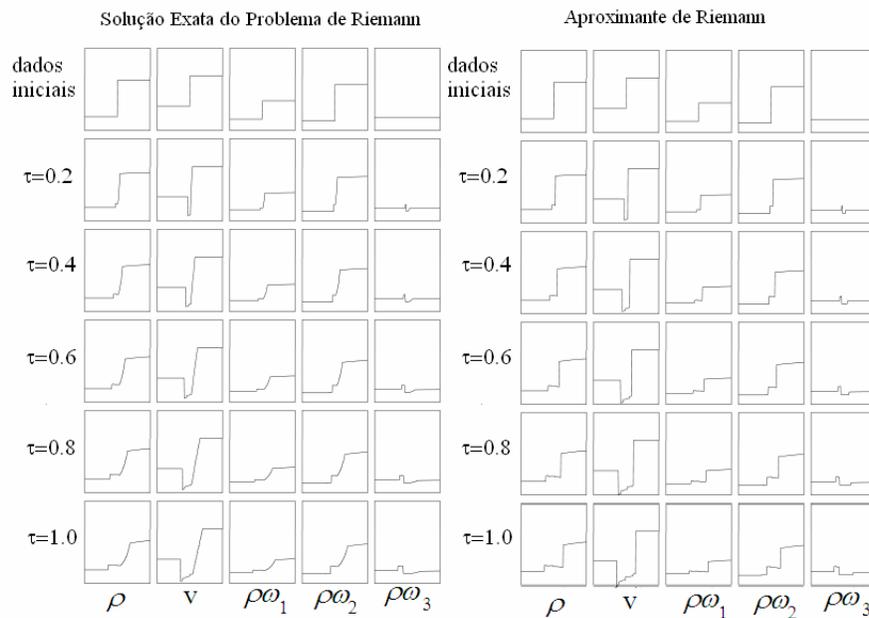


Figura 7.19 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.8$. Dados iniciais: Caso III.

Analogamente aos casos anteriores, a influência raio de curvatura pode ser observada comparando as figuras 7.19 ($R_i=0.05$ e $\alpha=0.8$) e 7.20 ($R_i=2.05$ e $\alpha=0.8$) e as figuras 7.21 ($R_i=0.05$ e $\alpha=0.2$) e 7.22 ($R_i=2.05$ e $\alpha=0.2$). Ao contrário do caso 2, o aumento do raio de curvatura diminui a curvatura da densidade próximo da superfície externa da casca esférica (influenciando da mesma forma $\rho\omega_1$, $\rho\omega_2$ e $\rho\omega_3$). Como nos

casos anteriores (I e II), o aumento do raio de curvatura torna o comportamento da velocidade mais uniforme no salto.

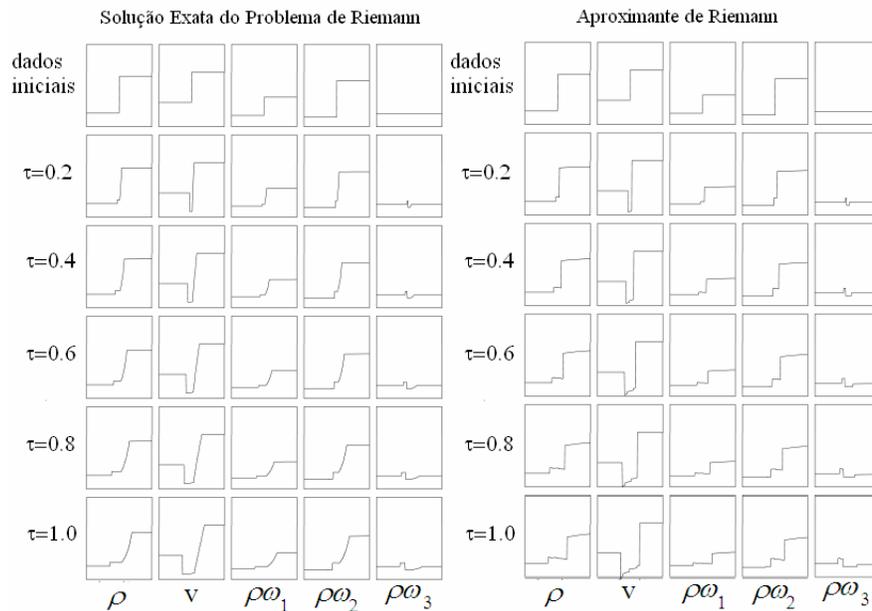


Figura 7.20 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=2.05$ e $\alpha=0.8$. Dados iniciais: Caso III.

Na figura 7.15 tem-se a variação de v , ρ e $\rho\omega_i$, $i=1,2,3$, considerando soluções exata e aproximada do problema de Riemann, para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.8$; enquanto a figura 7.16 considera $R_i=2.05$ e $\alpha=0.8$. A influência raio de curvatura é menor que no caso anterior, cujo aumento diminui a curvatura da densidade próximo da superfície interna da casca esférica, carregando esta influência para $\rho\omega_1$, $\rho\omega_2$ e $\rho\omega_3$. e torna o comportamento da velocidade mais uniforme no salto. Comparando as figuras 7.19 e 7.21 e as figuras 7.20 e 7.22, não se observa influência da taxa de destruição do poluente 1, ao variar o parâmetro α de $\alpha=0.8$ para $\alpha=0.2$.

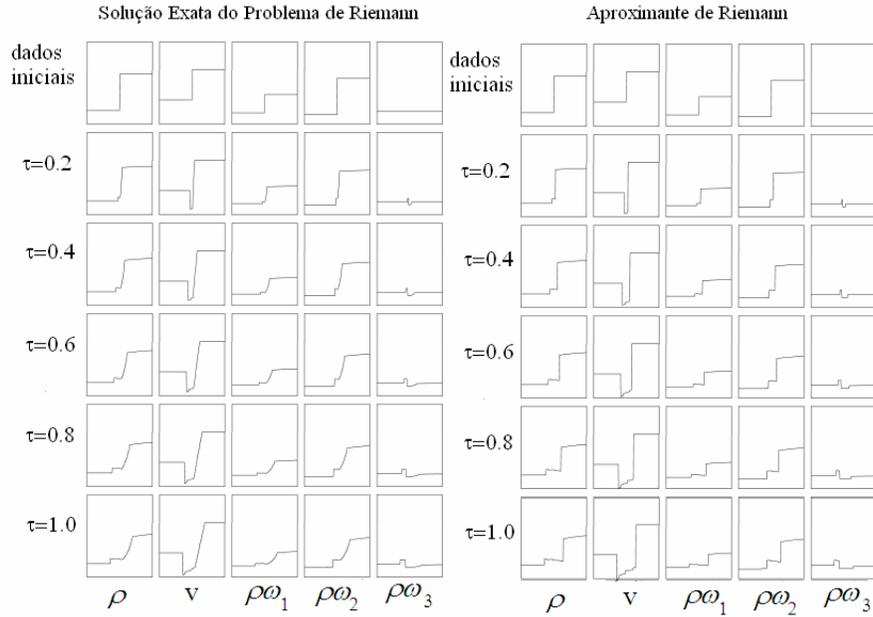


Figura 7.21 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.2$. Dados iniciais: Caso III.

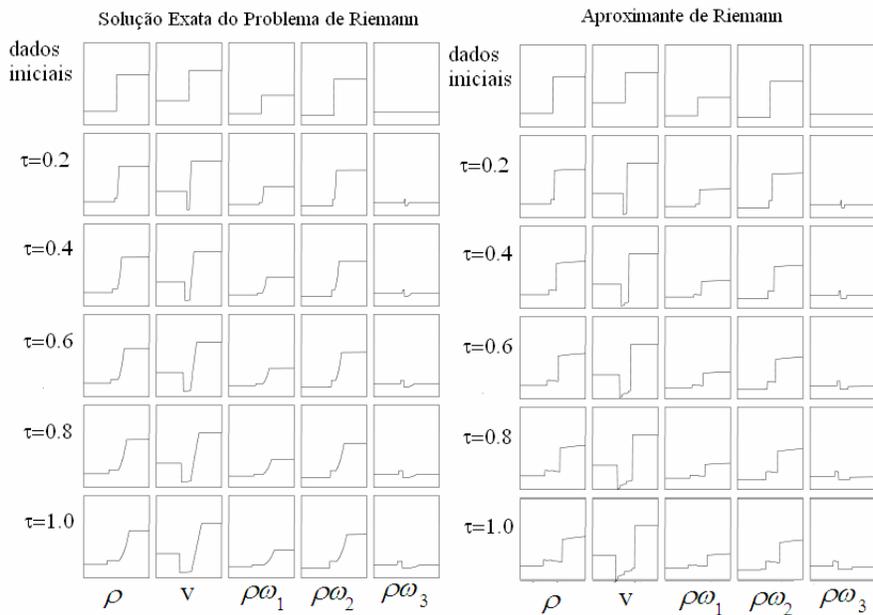


Figura 7.22 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=2.05$ e $\alpha=0.2$. Dados iniciais: Caso III.

No Caso IV são consideradas funções degrau, que assumem um valor à esquerda do raio de curvatura médio e um outro valor à direita do raio de curvatura médio como condições iniciais para a velocidade ($v_{0_E} = 1.0$, $v_{0_D} = 0.0$), e para as concentrações dos poluentes, ou seja: $\omega_{01_E} = 0.1$, $\omega_{01_D} = 0.9$, $\omega_{02_E} = 0.1$, $\omega_{02_D} = 0.9$ e $\omega_{03_E} = 0.9$, $\omega_{03_D} = 0.1$, enquanto uma função linear decrescente é usada como massa específica inicial ($\rho_0 = (N - I + 1.) / N$).

A influência raio de curvatura pode ser observada comparando as figuras 7.23 ($R_i=0.05$ e $\alpha=0.8$) e 7.24 ($R_i=2.05$ e $\alpha=0.8$), que mostram a variação de v , ρ e $\rho\omega_i$, $i=1,2,3$, considerando soluções exata e aproximada do problema de Riemann. Ao comparar estas figuras verifica-se que o aumento raio de curvatura diminui a curvatura da densidade próximo da superfície interna da casca esférica. Porém a influência em $\rho\omega_1$, $\rho\omega_2$ e $\rho\omega_3$ é praticamente imperceptível, o mesmo ocorrendo para a velocidade, Estas variáveis apresentam comportamento muito próximo ao se comparar as soluções exata e aproximada do problema de Riemann, nos dois casos.

Como nos casos anteriores, não se observa influência da taxa de destruição do poluente 1, ao variar o parâmetro α de $\alpha=0.8$ para $\alpha=0.2$, razão pela qual não foram apresentados os resultados.

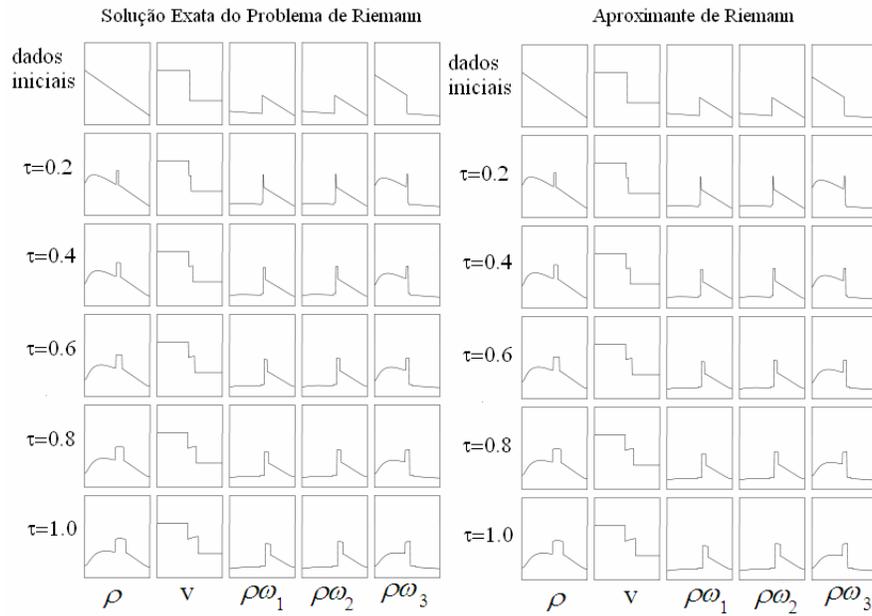


Figura 7.23 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes

($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=0.05$ e $\alpha=0.8$. Dados iniciais: Caso IV.

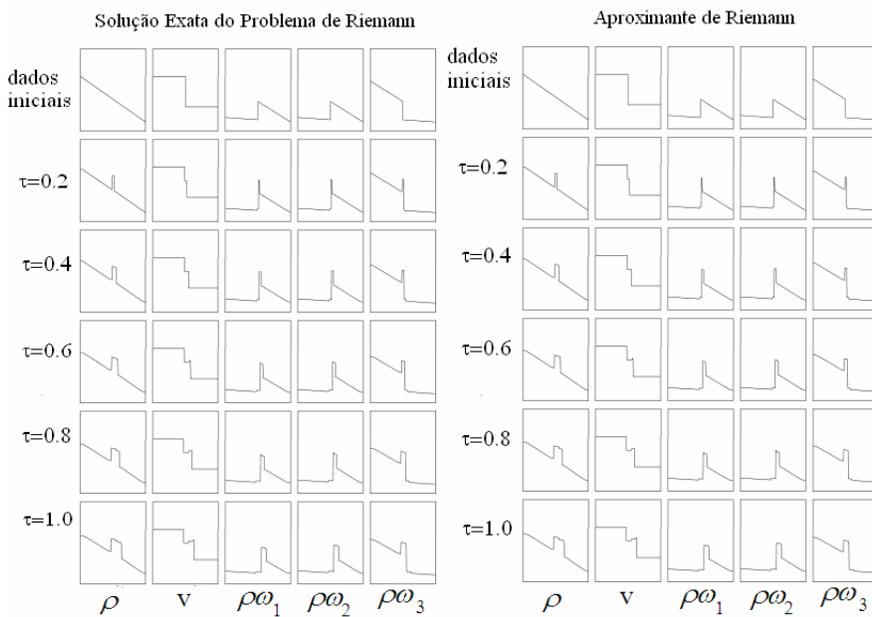


Figura 7.24 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes

($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=2.05$ e $\alpha=0.8$. Dados iniciais: Caso IV.

No Caso V são consideradas funções degrau, que assumem um valor à esquerda do raio de curvatura médio e um outro valor à direita do raio de curvatura médio como condições iniciais para a velocidade ($v_{0_E} = 1.0, v_{0_D} = 0.0$), para a massa específica inicial ($\rho_{0_E} = 0.1, \rho_{0_D} = 0.9$) e para as concentrações dos poluentes 2 e 3, ou seja: $\omega_{0_{2_E}} = 0.1, \omega_{0_{2_D}} = 0.9$ e $\omega_{0_{3_E}} = 0.9, \omega_{0_{3_D}} = 0.1$, enquanto a concentração inicial do poluente 1 é uma função linear decrescente ($\omega_{0_{1_E}} = 0.1 + 0.8 * ((I - 1) / M)$).

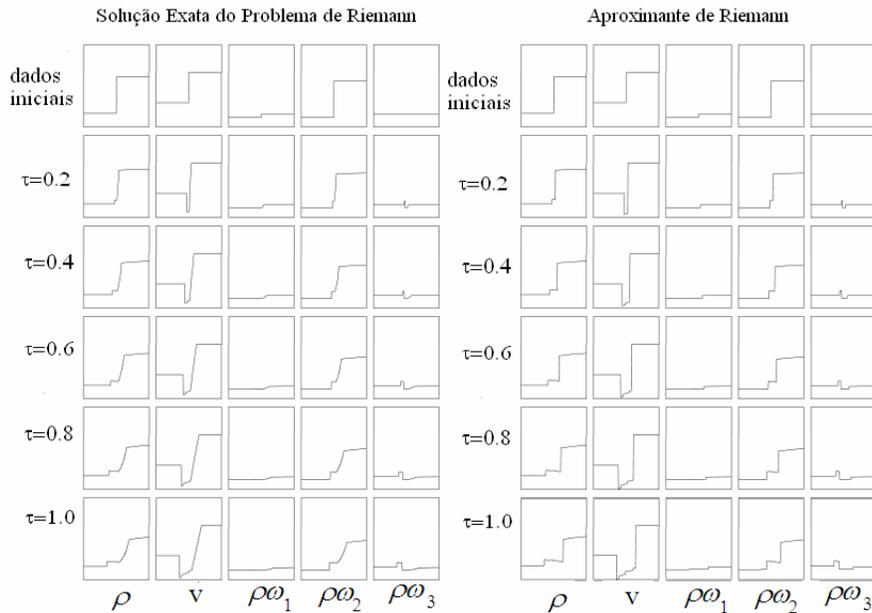


Figura 7.25 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i, i=1,2,3$) com a posição radial para $R_f=0.05$ e $\alpha=0.2$. Dados iniciais: Caso V.

Como em todos os casos anteriores, não se observa influência apreciável da taxa de destruição do poluente 1, ao variar o parâmetro α de $\alpha=0.8$ para $\alpha=0.2$, escolhendo-se, portanto, mostrar os resultados para $\alpha=0.2$ para observar a influência raio de curvatura, nas figuras 7.25 ($R_f=0.05$) e 7.26 ($R_f=2.05$). Nota-se que o aumento

raio de curvatura diminui a inclinação da densidade próximo da superfície externa da casca esférica. Como no caso anterior, a influência em $\rho\omega_1$, $\rho\omega_2$ e $\rho\omega_3$ é praticamente imperceptível, mas se observa variação da velocidade na região do salto.

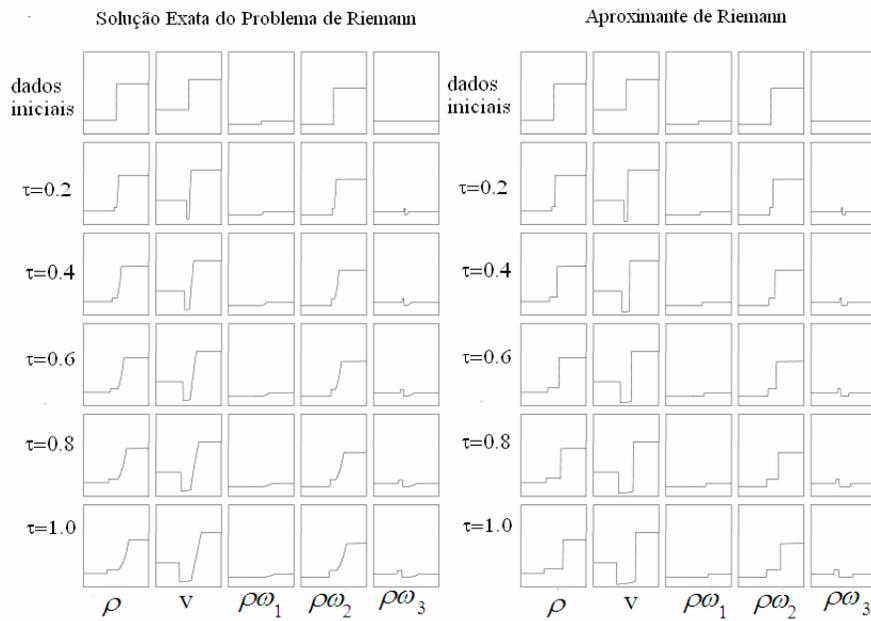


Figura 7.26 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição radial para $R_i=2.05$ e $\alpha=0.2$. Dados iniciais: Caso V.

7.4 Comparação direta entre a solução exata do Problema de Riemann e o Aproximante

Neste item, para uma melhor comparação entre os resultados, obtidos através do aproximante de Riemann e da solução exata do problema de Riemann são apresentados gráficos com a diferença das mesmas. Os resultados foram obtidos empregando o esquema de Glimm, sem a partição do operador, para um problema homogêneo para os 3 poluentes, sem termo de geração. Analogamente aos resultados apresentados no item 7.1, são consideradas as seguintes simplificações para a obtenção do problema homogêneo associado à equação (2.39): o problema é descrito no sistema de coordenadas cartesianas e o termo de geração é suposto nulo, $r_i = -\alpha_i \omega_i = 0$, $i = 1, 2, 3$.

Foram analisados todos os casos de condições iniciais apresentados no item 7.3 e os resultados, apresentados nas figuras 7.27, 7.29, 7.31, 7.33 e 7.35, foram normalizados pela equação (7.4). Estes resultados podem ser interpretados como se o raio de curvatura fosse infinito.

Os resultados são apresentados em pares de figuras, onde a primeira considera a comparação entre as duas metodologias empregadas para tratar o problema de Riemann associado, colocando, lado a lado os resultados obtidos por ambas enquanto a segunda apresenta, num mesmo gráfico, a diferença entre as duas soluções, para ρ , v e $\rho\omega_i$, obtidas através das expressões: $\varepsilon(\rho) = \rho_{aprox} - \rho_{exata}$, $\varepsilon(v) = v_{aprox} - v_{exata}$, $\varepsilon(\rho\omega_1) = \rho\omega_{1aprox} - \rho\omega_{1exata}$, $\varepsilon(\rho\omega_2) = \rho\omega_{2aprox} - \rho\omega_{2exata}$, $\varepsilon(\rho\omega_3) = \rho\omega_{3aprox} - \rho\omega_{3exata}$. Estes últimos resultados, mostrados nas figuras 7.28, 7.30, 7.32, 7.34 e 7.36, não foram normalizados, o que permite visualizar diferenças significativas entre as duas soluções, mas pode mascarar diferenças muito pequenas.

As figuras 7.27 e 7.28 referem-se ao caso I, mostrando claramente as diferenças entre as duas metodologias de solução apresentadas, sempre que ocorrem conexões por rarefação. Neste caso, as diferenças são mais perceptíveis para ρ e v , onde as conexões mais suaves podem ser observadas na solução exata.

No caso II, analisado pelas figuras 7.29 e 7.30, as soluções também apresentam diferenças observáveis para ρ e v , não sendo detectadas as pequenas diferenças que ocorrem quando a solução exata origina conexões por rarefação para $\rho\omega_i$.

As figuras 7.31 e 7.32 foram obtidas a partir das condições iniciais descritas no item 7.3 como caso III. Neste caso, as soluções pelas duas metodologias mostram diferenças significativas, principalmente no caso da velocidade, como pode ser observado na figura 7.32. A densidade também apresenta diferença apreciável, mas a escala utilizada não permite observar diferenças na concentração do poluente 1 e as diferenças na concentração do poluente 2, observadas na figura 7.31 também não são completamente detectadas na figura 7.32.

O caso IV, descrito no item 7.3, é apresentado nas figuras 7.33 e 7.34. Observa-se que as conexões da solução exata ocorrem por choques, permitindo observar total concordância para todas as variáveis na figura 7.34.

As figuras 7.35 e 7.36 referem-se ao caso V, descrito no item anterior. Neste caso, as diferenças entre as soluções empregando o aproximante de Riemann e a solução exata, mostradas na figura 7.36, são bastante acentuadas para a velocidade, além de serem claramente observáveis para a densidade. No caso da concentração do poluente 1, as mínimas diferenças observadas na figura 7.35 não chegam a ser detectadas na figura 7.36, enquanto são detectadas algumas diferenças nas concentrações dos poluentes 2 e 3, mas não todas.

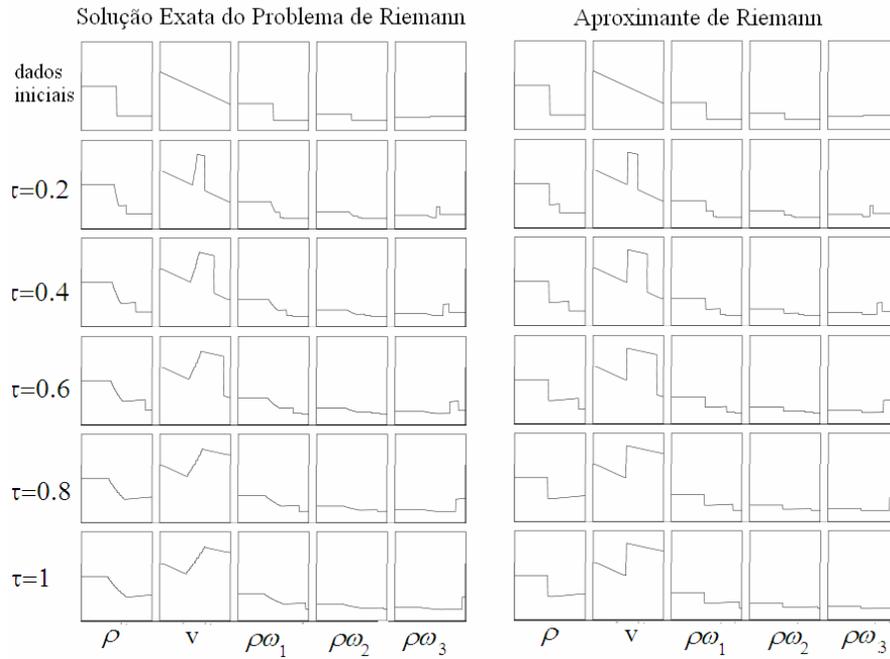


Figura 7.27 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição, para o caso I.

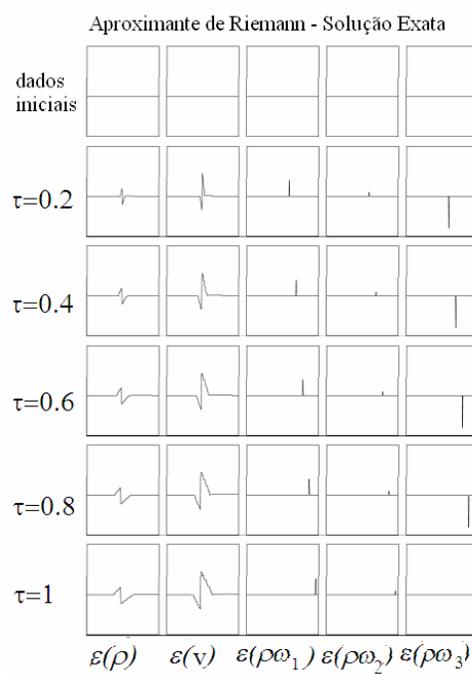


Figura 7.28 Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.27, considerando as variações de ρ , v e $\rho\omega_i$, com a posição.



Figura 7.29 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição, para o caso II.

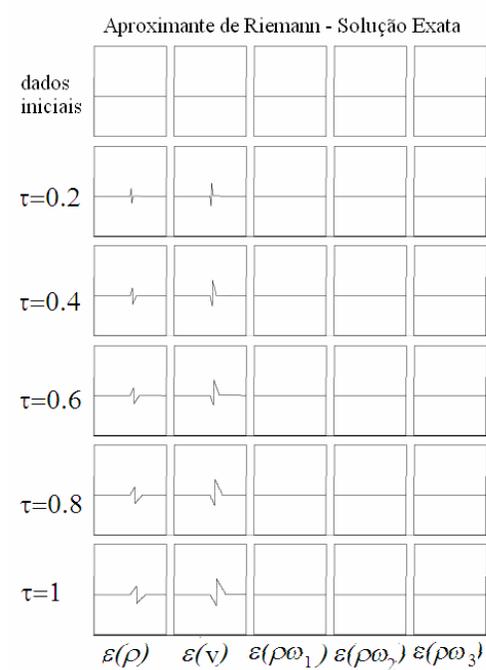


Figura 7.30 Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.29, considerando as variações de ρ , v e $\rho\omega_i$, com a posição.

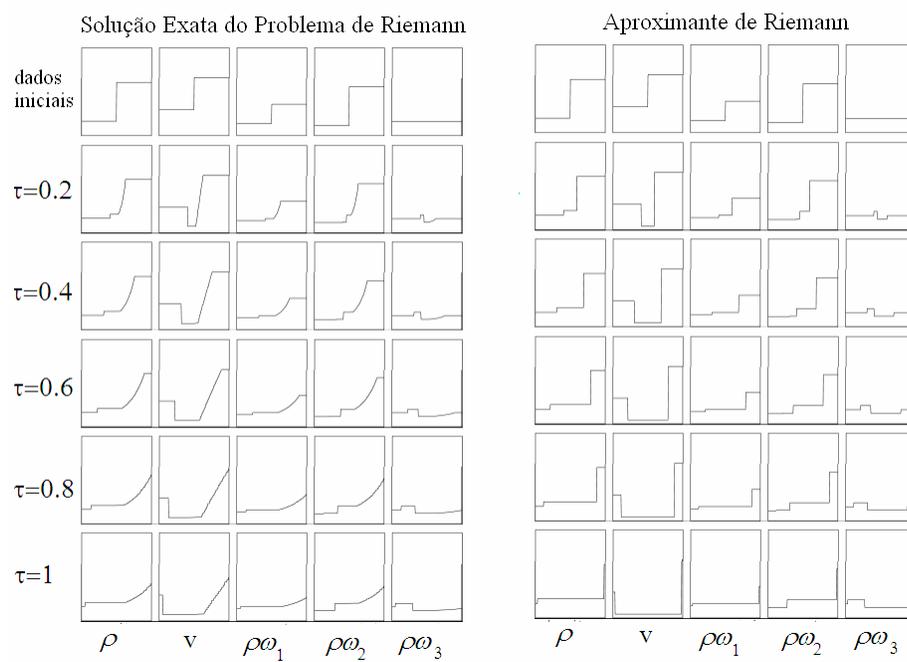


Figura 7.31 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição, para o caso III.

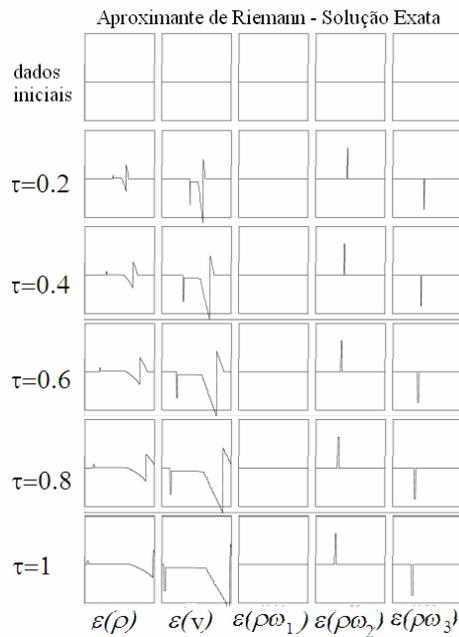


Figura 7.32 Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.31, considerando as variações de ρ , v e $\rho\omega_i$, com a posição.

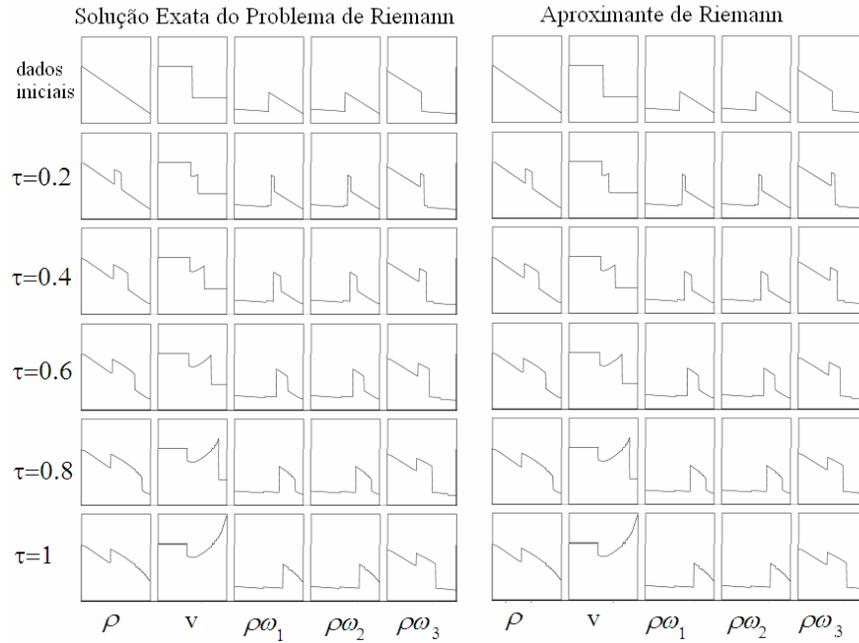


Figura 7.33 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição, para o caso IV.

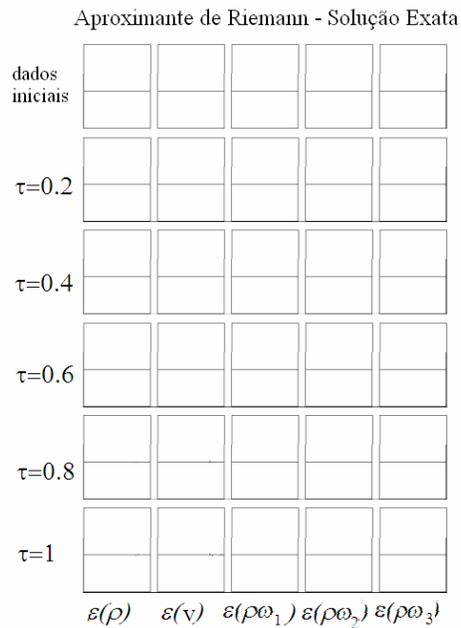


Figura 7.34 Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.33, considerando as variações de ρ , v e $\rho\omega_i$, com a posição.

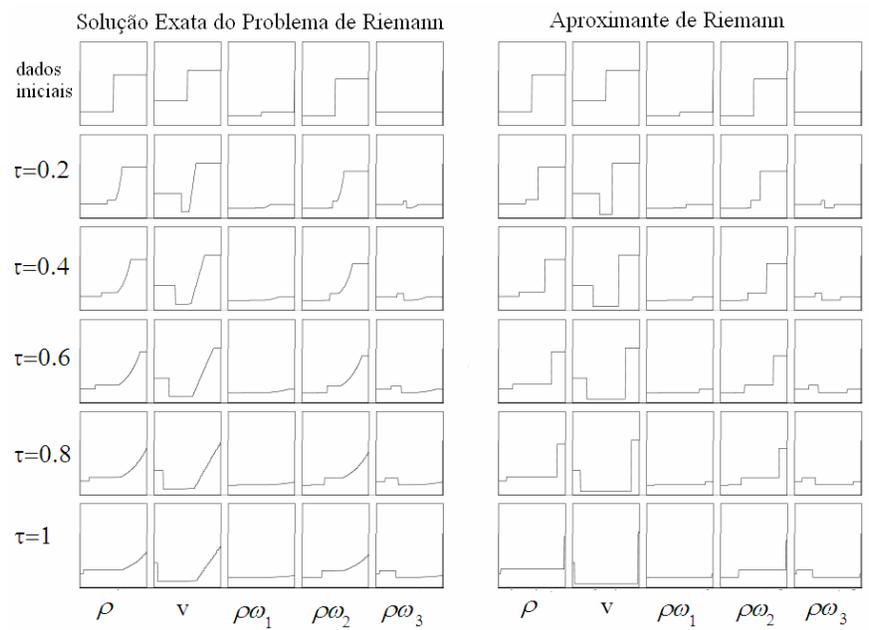


Figura 7.35 Variação da densidade do gás, velocidade e concentração dos poluentes ($\rho\omega_i$, $i=1,2,3$) com a posição, para o caso V.

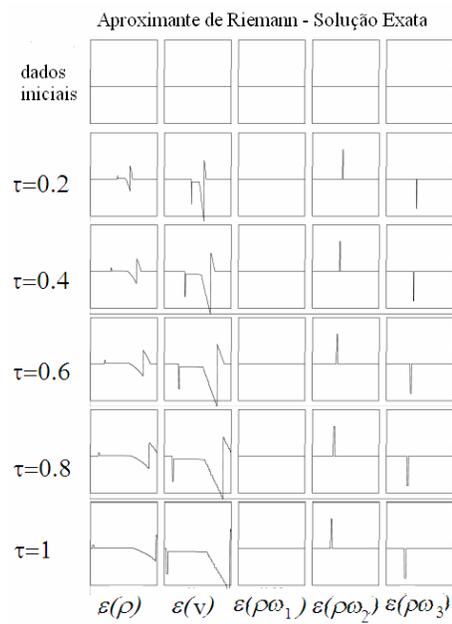


Figura 7.36 Diferença entre as soluções apresentadas na figura 7.35, considerando as variações de ρ , v e $\rho\omega_i$, com a posição.

É interessante notar que, em todos os casos tratados na seção 7.4, após calcular o erro médio percentual para as variáveis ρ e $\rho\omega_i$, definido como:

$$\begin{aligned}\varepsilon_\rho &= \frac{1}{\Delta r} \int_{R_i}^{R_e} \frac{|\rho_{exata} - \rho_{aprox}|}{\rho_{exata}} dr \\ \varepsilon_{\rho\omega_i} &= \frac{1}{\Delta r} \int_{R_i}^{R_e} \frac{|\rho\omega_i_{exata} - \rho\omega_i_{aprox}|}{\rho\omega_i_{exata}} dr, \quad i = 1, 3\end{aligned}\tag{7.1}$$

tem-se sempre: $\varepsilon_\rho < 0.6\%$ e $\varepsilon_{\rho\omega_i} < 0.6\%$.

Uma observação importante acerca do aproximante de Riemann empregado neste trabalho é a economia de tempo computacional. A solução exata do problema de Riemann, origina, a cada passo, 4 possíveis soluções, sendo necessário uma seleção entre elas, que demanda esforço computacional. No aproximante proposto neste trabalho, não há necessidade de escolha de soluções, uma vez que as conexões são sempre constantes por partes (tipo choque-choque). Na maioria dos problemas simulados, a metodologia padrão (solução exata do problema de Riemann associado) consumiu cerca de 320 segundos, enquanto a metodologia proposta gastou cerca de 180 segundos, num computador “Intel Dual Core” E-5200 (2.5 GHz), com 2 GB de RAM, DDR2.

Capítulo 8

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

A metodologia numérica apresentada neste trabalho permitiu obter uma técnica de aproximação muito rápida e precisa para sistemas não lineares de equações diferenciais parciais hiperbólicas, que podem representar matematicamente o transporte de m poluentes na atmosfera. A parcela não homogênea das equações, no caso estudado, devido à geometria esférica e ao termo de geração, foi tratada utilizando uma técnica de fatoração do operador. Em outras palavras, o sistema hiperbólico não homogêneo resultante foi simulado através de uma combinação do método de Glimm e da técnica de fatoração do operador.

O aproximante de Riemann proposto, que foi utilizado na implementação do método de Glimm, permite uma solução computacionalmente mais rápida – utilizando menos da metade do tempo de CPU, por não requerer a seleção entre quatro possíveis soluções – que preserva as equações de conservação na forma fraca, utilizando uma

precisão previamente escolhida em nível global, que pode ser tão grande quanto desejado.

Dentre as metodologias numéricas normalmente utilizadas para tratar problemas descontínuos, o método de Glimm é o que melhor preserva a identidade do choque. Embora sua aplicação esteja restrita a problemas unidimensionais, este método apresenta duas características importantes que devem ser salientadas. A primeira é que o método de Glimm clássico tende para a solução exata (na forma fraca) quando o comprimento dos degraus tende a zero e a segunda é a sua capacidade de não dissipar choques, preservando, desta forma, sua magnitude e sua posição.

A técnica de fatoração do operador é uma ferramenta simples e efetiva que consiste, essencialmente, em tratar um problema simultâneo de forma seqüencial. O operador definido pelo sistema hiperbólico é decomposto em duas partes: a porção meramente hiperbólica – o problema homogêneo associado – que é separada da sua parte puramente evolutiva no tempo. O método de Glimm é utilizado para obter uma aproximação inicial para o problema homogêneo, que é posteriormente corrigida utilizando a aproximação da parte puramente evolutiva no tempo – um sistema ordinário – empregando o mesmo passo no tempo. Neste sentido, é possível fazer uma analogia com os métodos numéricos do tipo predição-correção.

Neste trabalho, a implementação do método de Glimm através de um aproximante de Riemann foi comparada com a metodologia usual para utilizar o esquema de Glimm – uma solução completa do problema de Riemann associado. A comparação entre as duas soluções mostrou o bom desempenho do aproximante proposto. Problemas simplificados, que se reduzem a sistemas de equações diferenciais parciais homogêneas, foram simulados, para permitir uma melhor comparação entre as duas formas de tratar o problema de Riemann.

A técnica de fatoração do operador poderia ser estendida a problemas de grande interesse, dentre os quais dois são particularmente relevantes. O primeiro seria considerar os termos difusivos – uma vez que o processo de difusão sempre está presente em fenômenos reais, em maior ou menor grau. Ao utilizar a técnica de partição do operador, a parte puramente hiperbólica não seria alterada e toda a metodologia desenvolvida neste trabalho poderia ser aplicada. Os termos difusivos poderiam ser tratados em conjunto com a porção evolutiva no tempo.

Outro problema de grande interesse surge a partir da incorporação da possibilidade de existência de reações químicas entre os constituintes da mistura na descrição do fenômeno, que acarretaria numa real interação química entre todos os componentes da mistura. No caso destes componentes serem poluentes, esta inclusão permitiria tratar problemas de grande interesse ambiental.

Referências:

- [1] Perkins, H.C., “Air Pollution”, McGraw-Hill, New York, USA, 1974.
- [2] Peixoto, J. P., Oort, A. H. “Interannual and interdecadal variability in the climate system”. In: Physics of Climate, cap. 16. New York, USA, American Institute of Physics, 1991.
- [3] Jacobson, M. Z., Fundamentals of Atmospheric Modeling, Cambridge University, Cambridge, Inglaterra, 2000.
- [4] Alley, R. et al. Contribuição do Grupo de Trabalho I para o Quarto Relatório de Avaliação do Painel Intergovernamental sobre Mudanças do Clima: Sumário para os Formuladores de Políticas. http://www.cptec.inpe.br/mudancas_climaticas/, 26/04/2007.
- [5] Slattery, C., Advanced Transport Phenomena, Springer-Verlag, Berlin, 1999.
- [6] Glimm, J., Solutions in the Large for Nonlinear Hyperbolic Systems of Equations, Comm. Pure Appl. Math., vol. **18**, pp. 697-715, 1965.
- [7] Chorin, A. J. “Random Choice Solution of Hiperbolic Systems”, Journal of Comput. Physics, vol. **22**, pp. 517-533, 1976.
- [8] Martins-Costa, M.L. e Saldanha da Gama, R.M., Glimm’s Method Simulation for the Pollutant Transport in an Isothermal Atmosphere, Comput. Mech., vol. **32/3**, pp. 214-223, 2003.
- [9] Saldanha da Gama, R. M. e Martins-Costa, M. L., An Alternative Procedure for Approximating Hyperbolic Systems of Conservation Laws. Nonlinear Analysis. Real World Applications, vol. **9**, pp. 1310-1322, 2008.
- [10] Martins-Costa, M. L., Porto, E. M. e Saldanha da Gama, R. M., An Alternative Procedure for Simulating a Class of Hyperbolic Systems. In: 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering - ENCIT 2006, Curitiba. Anais do 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, 2006.

- [11] Porto, E. M., Martins-Costa, M. L. e Saldanha da Gama, R. M., An Alternative Numerical Procedure for Simulating Multicomponent Flows in the Atmosphere. In: 19th International Congress of Mechanical Engineering, 2007, Brasília. Anais do 19th International Congress of Mechanical Engineering, 2007.
- [12] Godunov, S. K., “A Finite Difference Method for the Computation of Discontinuous Solutions of the Equations of Fluid Dynamics”, Mat. Sb., vol. **47**, pp. 357-393, 1959.
- [13] Toro, E. F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. A Practical Introduction, Springer, Berlin, 1997.
- [14] Courant, R, Isaacson, E., e Rees, M., “On the Solution of Nonlinear Hyperbolic Differential Equations by Finite Differences”, Comm. Pure and Applied Mathematics, vol **5**, pp. 243-255, 1952.
- [15] Lax, P. D., “Weak Solutions of Non Linear Hyperbolic Equations and Their Numerical Computation”, Comm. Pure and Applied Mathematics, vol. **7**, pp. 159-193, 1954.
- [16] Lax, P. D. e Wendroff, B., “Difference Schemes for Hyperbolic Equations with High Order of Accuracy”, Comm. Pure and Applied Mathematics, vol. **17**, pp. 381-398, 1964.
- [17] MacCormack, R. W., “The Effect of Viscosity in Hypervelocity Impact Cratering”, AIAA Paper, No. 69-354, IAA, Cincinnati, 1969.
- [18] Engquist, B. e Osher, S., “Stable and Entropy Satisfying Approximations for Transonic Flow Calculations”, Mathematics of Computation, vol. **34**, pp. 45-75, 1980.
- [19] Osher, S., “Shock Modeling in Aeronautics”, Numerical Methods for Fluid Dynamics, pp. 179-218, 1982.
- [20] Roe, P.L., “Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes”, Journal of Computational Physics, vol. **43/2**, pp. 200-212, 1981.

- [21] van Leer, B., "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme V. A Second Order Sequel to Godunov's Method. *Journal of Computational Physics*, vol. **32**, pp. 101-136, 1979.
- [22] Hopf, E., The Partial Differential Equation $(u)_t + u (u)_x = \mu (u)_{xx}$, *Comm. Pure Appl. Math.*, vol. **3**, pp. 201-230, 1950.
- [23] Oleinik, O., Discontinuous Solutions of Nonlinear Differential Equations, *Amer. Math. Soc. Trans. Ser. 2*, vol. **26**, pp. 95-172, 1957.
- [24] Dafermos, C. M., *Hyperbolic Systemns of Conservation Laws in Continuum Physics*, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [25] Chen, G. Q. e Frid, H., Large-time behavior of solutions of conservation laws, *J. Diff. Eqs.*, vol. **152**, pp. 308-357, 1999.
- [26] Serre, D., *Systems of Conservation Laws, Vols. 1-2*, Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [27] Gu, C.H., Li, T.T., Yu, W.C. e Hou, Z.Y. Discontinuos Initial Value Problems for Systems of Quasilinear Hyperbolic Equations (I)-(III) – *Acta Maths. Simics*, vol. **11**, 314-327, 1961, vol. **12**, pp. 132-143, 1962.
- [28] Ding, X. Chang, T., Wang, C.H. Hsiao, L. e Li, T.C. A Study of the Global Solutions for Quasi-linear Hyperbolic Systems of Conservation Laws, *Sci. Simics*, vol. **16**, pp. 317-335, 1973.
- [29] Chang, T. e Hsiao, L., *The Riemann Problem and Interaction of Waves in Gas Dynamics*, Longman Scientific & Technical Harlow; John Wiley & Sons, Inc. New York, 1989.
- [30] Ding, X., e Liu, T.P., *Nonlinear Evolutionary Partial Differencial Equations*, AMS/IP Studies in Advanced Mathematics, **3**, AMS Providence, IP, Cambridge, MA, 1997.
- [31] Li, J., Zhang, T., e Yang, S., *The Two-Dimensional Riemann Problem in Gas Dynamics*, Longman (Pitman Monographs, **98**), Essex, 1998.

- [32] Li, T. T. e Yu, W. C., Boundary Value Problem for Quasilinear Hyperbolic Systems, Duke University, Mathematics Series, **5**, Duke University, Durbam, N.C., 1985.
- [33] Rohsenow, W. M. e Choi, H. "Heat, Mass and Momentum Transfer", Prentice-Hall, Englewood Cliffs, USA, 1961.
- [34] Truesdell, C e Toupin, R.A., The Classical Field Theories, Handbuch der Physik, Springer-Verlag, Berlin, 1960.
- [35] Gurtin, J., An Introduction to Continuum Mechanics, Academic Press, New York, 1981.
- [36] LeVeque, R.J., Numerical Methods for Conservation Laws, Birkhauser, Berlin, 1992.
- [37] Smoller, J., Shock-Waves and Reaction-Diffusion Equations, Cambridge University Press, New York, 1983.
- [38] John, F. Partial Differential Equations. Springer-Verlag, Berlin, 1982.
- [39] Saldanha da Gama, R.M., Dynamical Analysis of a Compressible Elastic Rod in the Current Configuration., Comput. Mech., vol **7**, pp. 41- 48, 1990.
- [40] Freitas Rachid, F.B., Saldanha da Gama, R.M., Costa Mattos, H., Modelling the Hydraulic Transients in Damageable Elasto-Viscoplastic Pipign Systems, Appl. Math. Modelling, vol. **182**, pp. 207-215, 1994.
- [41] Martins-Costa, M.L. e Saldanha da Gama, R.M., Numerial Simulations of One Dimensional Flows Through Porous Media with Shock Waves, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. **52**, pp. 1047-1067, 2001.
- [42] Sod, G.A., A Numerical Study of a Converging Cylindrical Schock, Journal Fluid Mech., vol. **83**, pp. 785-794, 1977.
- [43] Marchesin, D. e Paes-Leme, P.J., Shocks in Gas Pipelies, SIAM Journal. Sci. Stat. Comput., vol. **4**, pp. 105-116, 1983.

- [44] Saldanha da Gama, R.M. e Sampaio, R., Simulation of the Filling-up of a Porous Slab Against Gravity, *Anais da Int. Conf. on Comput. Mech.*, Springer, vol. **7**, pp. 273-278, Tóquio, Japão, 1987.
- [45] Saldanha da Gama, R.M. e Martins-Costa, M.L., Numerical Simulation of Transport Phenomena in Nonsaturated Porous Media, ASME, HTD, *Anais da 32ª National Heat Transfer Conf. Vol. 399*, pp. 99-106, Baltimore, EUA, 1997.
- [46] Martins-Costa, M.L., Saldanha da Gama, R.M. e Sampaio, R., Incompressible Fluid Flows Through a Nonsaturated Porous Medium, *Beitrag zur Mechanik-Forschungsbericht aus dem Fachbereich Bauwesen*, ed. W. Walther, Universitat Gesamthochschule Essen., vol. **66**, pp. 283-303, 1995.
- [47] Keyfitz, B., e Kranzer, H. C., Existence and Uniqueness of Entropy Solutions to the Riemann Problem for Hyperbolic Systems of two Nonlinear Conservation Laws, *Journal. Diff. Eqns*, vol. **27**, pp. 444-476, 1978.
- [48] Lax, P., Shock Waves and Entropy, in *Contribution to Nonlinear Functional Analysis*, New York, Academic Press, 1971.
- [49] John, F., Formation of Singularities in Onedimensional Nonlinear Wave Propagation., *Comm. Pure Appl. Math. Vol. 27*, pp. 337- 405, 1974.
- [50] Colella, P. An Analysis of the Effect of Operator Splitting and of the Sampling Procedure on the Accuracy of Glimm's Method. PhD Thesis, Department of Mathematics, University of California, USA, 1978.
- [51] Lax, P.D. e Wendroff, B., Systems of Conservation Laws. *Comm. Pure Appl. Math.*, vol. **13**, 217-237, 1960.
- [52] Godlewski, E., Numerical Approximations of Hyperbolic Systems of Conservation Laws, Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [53] Godlewski, E., e Raviart, P.A., *Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, Ellipses Publicatiopns, 1991.
- [54] Kroner, D., Numerical Schemes for Conservation Laws, Wiley-Teubner Series, *Advances in Numerical Mathematics*, 1997.

- [55] Einfeldt, B., Munz, C.D., Roe, P.L. e Sjogreen, B., On Godunov-type Methods Near Low Densities, *Journal of Computational Physics*, **92**, pp. 273-295, 1991.

APÊNDICE

Métodos Numéricos para Leis de Conservação

1. Introdução

A dificuldade de se obter uma solução analítica para problemas envolvendo equações diferenciais parciais fez com que fossem desenvolvidos métodos numéricos como forma de se chegar a uma solução aproximada do problema estudado. Nos últimos cinquenta anos, devido à crescente capacidade dos recursos computacionais, simuladores numéricos eficientes e robustos surgem cada vez mais, nas diversas áreas do conhecimento científico. O termo simulador é usado para designar programas computacionais complexos, cuja base são equações diferenciais empregadas para modelar um problema físico.

A abordagem clássica para a construção de métodos numéricos de equações diferenciais parciais emprega a substituição das derivadas da equação diferencial parcial por aproximações discretas. No entanto, existe uma dificuldade em aplicar estes métodos clássicos no cálculo de soluções que podem ter uma característica descontínua. Lax e Wendroff [51] superaram tal dificuldade considerando aproximações numéricas da formulação integral, ao invés da equação diferencial parcial. Desta forma, eles introduziram a noção de esquemas na forma conservativa, no qual mostram que se o método numérico conservativo converge, então ele converge para a solução fraca do problema de leis de conservação.

2. Esquemas Conservativos

Consideremos o problema escalar de Cauchy no espaço unidimensional, ou seja,

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} = 0, & \mathbf{u} = \mathbf{u}(x, t), \quad \mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u}) \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0 \\ \text{com} & \mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0(x) \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Podemos discretizar o plano $x-t$ escolhendo, por exemplo, uma malha de comprimento $h \equiv \Delta x$, com espaçamento de tempo $k \equiv \Delta t$, definindo a discretização dos pontos (x_j, t_n) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} x_j &= jh, \quad j = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \\ t_n &= nk, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Além disto, definimos:

$$x_{j+1/2} = x_j + \frac{h}{2} = \left(j + \frac{1}{2}\right)h$$

O principal objetivo de qualquer método numérico para resolver (A.1) é obter aproximações $\mathbf{u}_j^n \in \mathbb{R}$ da solução $\mathbf{u}(x_j, t_n)$.

Assim, uma forma de discretizar o problema (A.1) para chegar-se a soluções no sentido fraco, consiste em integrá-lo em x e em t , transformando-o em uma forma integral. Se tomarmos como domínios espacial e temporal os seguintes intervalos, respectivamente:

$$I_j = \left[x_{j-1/2}, x_{j+1/2} \right] = \left[x_j - \frac{\Delta x}{2}, x_j + \frac{\Delta x}{2} \right], \quad (\text{A.2})$$

$$I_n = [t_n, t_{n+1}] = [n\Delta t, (n+1)\Delta t]$$

Então, a integral da equação (A.1)

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} \right] dx dt = 0 \quad (\text{A.3})$$

será dada por:

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} [\mathbf{u}(x, t_{n+1}) - \mathbf{u}(x, t_n)] dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} [\mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{j+1/2}, t)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{j-1/2}, t))] dt = 0 \quad (\text{A.4})$$

Podemos dizer, a partir de (A.4), que a quantidade de \mathbf{u} contida no intervalo (ou célula) I_j somente varia no tempo Δt devido ao valor do fluxo \mathbf{f} nos extremos do mesmo (fronteira da célula).

Definimos \mathbf{u}_j^n como o valor médio da função $\mathbf{u}(x, t)$ no intervalo I_j e no instante de tempo $t_n = n\Delta t$, ou seja,

$$\mathbf{u}_j^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{u}(x, t_n) dx \quad (\text{A.5})$$

Logo, (A.4) pode ser reescrita como:

$$(\mathbf{u}_j^{n+1} - \mathbf{u}_j^n) \Delta x + \int_{t_n}^{t_{n+1}} [\mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{j+1/2}, t)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{j-1/2}, t))] dt = 0 \quad (\text{A.6})$$

Se aproximarmos o termo integral em (A.6) pelos valores médios $\mathbf{f}_{j\pm\frac{1}{2}}^n$, isto é,

$$\mathbf{f}_{j\pm\frac{1}{2}}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{j\pm 1/2}, t)) dt \quad (\text{A.7})$$

Então, podemos escrever

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{f}_{j-1/2}^n - \mathbf{f}_{j+1/2}^n) \quad (\text{A.8})$$

onde os valores $\mathbf{f}_{j\pm 1/2}^n$, chamados fluxos numéricos, representam uma aproximação do fluxo físico $\mathbf{f}(\mathbf{u})$, em (A.1), nas fronteiras das células. A forma numérica de se calcular estes valores resulta em distintos esquemas. Na prática, estes fluxos são calculados em função das variáveis nas células vizinhas a I_j , segundo a seguinte expressão:

$$\mathbf{f}_{j\pm 1/2}^n = \phi(\mathbf{u}_{j-m}^n, \mathbf{u}_{j-m+1}^n, \dots, \mathbf{u}_{j+l}^n) \quad (\text{A.9})$$

onde m e l são inteiros não negativos.

Um esquema conservativo para a lei de conservação escalar (A.1) é um método numérico da forma (A.8), desde que satisfaça (A.9).

Uma condição, fundamental, necessária em relação a esta aproximação é a condição de consistência. Para que um esquema seja consistente (represente fielmente a equação diferencial quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$), ϕ deve ser tal que:

$$\phi(v, v, \dots, v) = \mathbf{f}(v) \quad (\text{A.10})$$

Isto significa dizer que o fluxo numérico que busca aproximar o fluxo físico em um certo estado, a partir dos valores do fluxo em estados próximos, deve ser exatamente igual a $\mathbf{f}(v)$ quando os estados próximos coincidem com v , isto é,

$$\mathbf{f}_{j\pm 1/2}^n(v, v, \dots, v) = \mathbf{f}(v) \quad \text{em } \mathbf{u} = v$$

Se um esquema conservativo consistente converge, o resultado é uma solução fraca da equação.

Dentre alguns exemplos de esquema conservativos podemos citar o esquema de Godunov, o esquema de Lax-Friedrichs e o esquema de Lax-Wendroff.

Teorema (Lax-Wendroff): Consideremos uma seqüência de malhas indexadas por $l=1,2,\dots$, com parâmetros $k_l, h_l \rightarrow 0$, quando $l \rightarrow \infty$. Seja $u_l(x, t)$ uma aproximação numérica calculada usando um esquema consistente e conservativo na malha l . Suponhamos que u_l converge para uma função u quando $l \rightarrow \infty$. Então $u(x, t)$ é uma solução fraca da lei de conservação, cuja definição é feita abaixo.

Definição: Seja $u_l(x, t)$ uma seqüência de aproximações numéricas para a função $u(x, t)$. Dizemos que $u_l(x, t)$ converge para $u(x, t)$ quando $l \rightarrow \infty$, se:

1. Sobre qualquer conjunto limitado $\Omega = [a, b] \times [0, T]$ no plano (x, t) ,

$$\|u_l - u\|_{1, \Omega} = \int_0^T \int_a^b |u_l(x, t) - u(x, t)| dx dt \rightarrow 0 \quad \text{quando } l \rightarrow \infty$$

1. Para cada T existe um $R > 0$, tal que:

$$TV(u_l(\cdot, t)) < R, \quad \forall 0 \leq t \leq T, \quad l = 1, 2, \dots$$

onde TV é a variação total de u . No caso discreto, definimos a variação total de uma seqüência de valores discretos $v^n = (u_j^n)$ por:

$$TV(v^n) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} |u_{j+1}^n - u_j^n| \quad (\text{A.11})$$

No caso linear, o teorema de equivalência de Lax estabelece que para um método consistente, a estabilidade é condição necessária e suficiente para convergência. Analogamente, para problemas não lineares, é necessária alguma forma de estabilidade que garanta a convergência do método.

Uma vantagem de esquemas conservativos e consistentes é que, quando existe convergência eles, automaticamente, convergem para soluções cujas descontinuidades satisfazem a condição de choque. Para garantir a convergência é necessário definir alguma forma de estabilidade.

Definição: Dizemos que um método numérico é TV estável se $TV(v^n)$ é uniformemente limitado para todo n .

Um modo de assegurar a TV estabilidade é requerer que a ação do operador de evolução temporal não aumente a variação total, de modo que a mesma, em qualquer tempo seja uniformemente limitada pela variação total do dado inicial. Para uma abordagem mais detalhada sobre a teoria de leis de conservação ver [36], [52], [53] e [54].

Faremos aqui uma breve discussão de alguns métodos numéricos utilizados na solução de equações diferenciais parciais de leis de conservação.

3. Esquema de Godunov

O esquema de Godunov [12] é baseado em soluções locais de problemas de Riemann. Lembrando que a única solução entrópica do problema de Riemann é da forma $\mathbf{u}(x, t) = w(x/t; \mathbf{u}_e, \mathbf{u}_d)$, onde w depende apenas de f e assume duas constantes de estado \mathbf{u}_E e \mathbf{u}_D , separadas por várias ondas, cujas velocidades são limitadas por $\max \{|f'(\xi)| : \xi \in [\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D]\}$.

Os resultados alcançados por Godunov motivaram várias linhas de investigação com a finalidade de estendê-lo a várias dimensões. Entretanto, todos estes esquemas apresentam a desvantagem de requerer o conhecimento da solução exata do problema de Riemann, o que os tornam, em geral, mais precisos, porém, computacionalmente mais custosos. Este elevado custo computacional reside no fato da necessidade de se resolver de forma iterativa um sistema de equações algébricas não lineares para se obter a solução exata do problema de Riemann.. Uma alternativa para contornar esta questão, então, é conseguir uma *solução aproximada* do problema, o que é feito através de esquemas menos custosos. Em geral, refere-se a este esquema como um método de reconstrução evolutivo.

O processo de reconstrução ocorre da seguinte maneira:

1. Inicialização \rightarrow assuma que a solução numérica \mathbf{u}^0 no tempo t_0 já tenha sido calculada e que a solução inicial \mathbf{u}_j^0 seja dada por:

$$\mathbf{u}_j^0 = \frac{1}{h} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{u}_0(x) dx$$

2. Evolução temporal \rightarrow procuramos a solução aproximada $\tilde{\mathbf{u}}^n(x, t)$ para o problema (A.1), isto é,

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}^n(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}}^n(x, t))}{\partial x} = 0 \text{ em } \mathbb{R} \times (t_n, t_{n+1}) \quad (\text{A.12})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}^n(x, t_n) = \mathbf{u}_j^n(x) \quad x \in (x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \quad (\text{A.13})$$

Os problemas (A.12)-(A.13) podem ser resolvidos de forma exata em um intervalo de tempo (t_n, t_{n+1}) pequeno, considerando que o dado inicial $\tilde{\mathbf{u}}(x, t)$ seja uma função constante (função degrau), dando origem a uma sequência de problemas

de Riemann. A solução exata até o momento em que as características dos problemas de Riemann vizinhos se interceptam é obtida unindo-se soluções locais de Riemann.

2. Reconstrução espacial: dado $\tilde{\mathbf{u}}^n(x, t_{n+1})$ no tempo t_{n+1} define-se a solução aproximada \mathbf{u}^{n+1} no tempo t_{n+1} como a média desta solução no tempo t_{n+1} , ou seja,

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \frac{1}{h} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{\mathbf{u}}^n(x, t_{n+1}) dx \quad (\text{A.14})$$

Estes valores são, então, usados para definir novos dados iniciais constantes para o problema de Riemann no intervalo de tempo (t_{n+1}, t_{n+2}) .

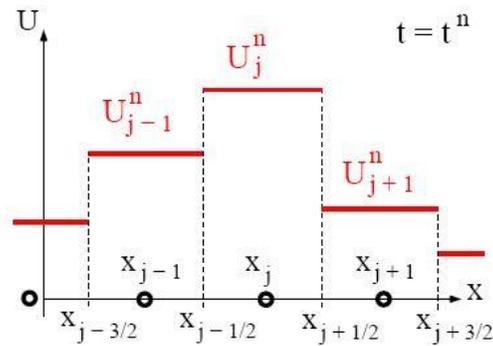


Figura A.1 – Método de reconstrução de Godunov. Dados iniciais constantes \mathbf{u}_j^n para o problema de Riemann em (t_n, t_{n+1}) .

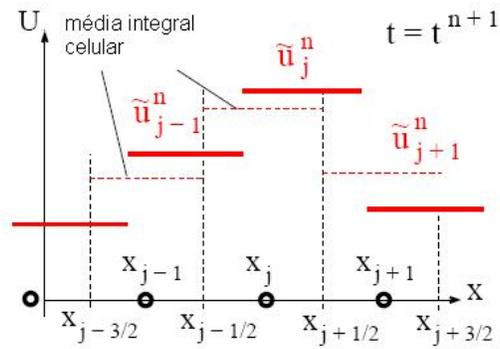


Figura A.2 – Solução exata \tilde{u}^n do problema de Riemann no tempo (t_n, t_{n+1}) no tempo final t_{n+1} . A nova solução u^{n+1} em t_{n+1} é obtida pela média celular.

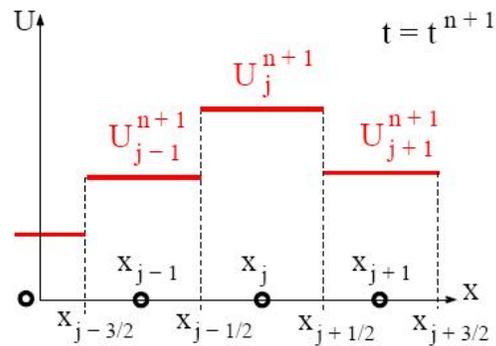


Figura A.3 – A solução u_j^{n+1} no tempo t_{n+1} é usada para definir dados iniciais constantes para o problema de Riemann em (t_{n+1}, t_{n+2}) .

Existem duas importantes características neste método que o torna atrativo do ponto de vista numérico. A primeira reside no fato da média celular (A.14) poder ser calculada de uma maneira simples, a partir da forma integral da lei de conservação, ou seja,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}^n(x, t)}{\partial t} &= -\frac{\mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}}^n(x, t))}{\partial x} \\
\Leftrightarrow \frac{d}{dt} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{\mathbf{u}}^n(x, t) dx &= -\left[\mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j+1/2}, t)) - \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j-1/2}, t)) \right] \\
\Leftrightarrow \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{d}{dt} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{\mathbf{u}}^n(x, t) dx dt & \\
= -\left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j+1/2}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j-1/2}, t)) dt \right] & \\
\Leftrightarrow \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{\mathbf{u}}^n(x, t_{n+1}) dx - \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{\mathbf{u}}^n(x, t_n) dx & \\
= -\left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j+1/2}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j-1/2}, t)) dt \right] &
\end{aligned}$$

Usando a definição em (A.14) e dividindo por h teremos que:

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \frac{1}{h} \left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j+1/2}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j-1/2}, t)) dt \right] \quad (\text{A.15})$$

A função fluxo numérico é definida por:

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n) = \frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j+1/2}, t)) dt \quad (\text{A.16})$$

Podemos reescrever (A.15) na seguinte forma conservativa:

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \frac{k}{h} \left[\mathbf{f}(\mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_{j-1}^n, \mathbf{u}_j^n) \right] \quad (\text{A.17})$$

A segunda característica é que a integral a ser calculada em (A.16) é trivial uma vez que $\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j+1/2}, t)$ é constante no ponto $x_{j+1/2}$ sobre o intervalo de tempo (t_n, t_{n+1}) . O valor constante de $\tilde{\mathbf{u}}^n$ ao longo da reta $x = x_{j+1/2}$ depende apenas dos dados que definem o problema de Riemann, que neste caso são \mathbf{u}_j^n e \mathbf{u}_{j+1}^n fornecidos pela condição inicial à esquerda e à direita de $x_{j+1/2}$, respectivamente. Definimos $\mathbf{u}^*(\mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n) = \tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j+1/2}, t) = cte \forall t \in (t_n, t_{n+1})$. Então, o fluxo numérico em (A.16) se reduz a:

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n) = f(\mathbf{u}^*(\mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n))$$

Assim, o método de Godunov pode ser reescrito da seguinte maneira:

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \frac{k}{h} \left[\mathbf{f}(\mathbf{u}^*(\mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}^*(\mathbf{u}_{j-1}^n, \mathbf{u}_j^n)) \right] \quad (\text{A.18})$$

Para um período de tempo muito longo, a solução pode não mais permanecer constante em $x_{j+1/2}$ devido ao efeito das características que surgem de problemas de Riemann vizinhos. No entanto, como as velocidades das ondas são limitadas pelos autovalores de $\mathbf{f}'(\mathbf{u})$ e os problemas de Riemann vizinhos estão a uma distância h , $\tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j+1/2}, t)$ será constante sobre o intervalo (t_n, t_{n+1}) contanto que k seja suficientemente pequeno, ou seja,

$$\max \left| \frac{k}{h} \lambda_p(u_j^n) \right| \leq 1 \quad (\text{A.19})$$

onde λ_p denotam os autovalores de $\mathbf{f}'(\mathbf{u})$. Este critério é chamado de número de Courant e está relacionado à estabilidade do método. Além disto, (A.19) permite a interação de ondas de problemas de Riemann vizinhos.

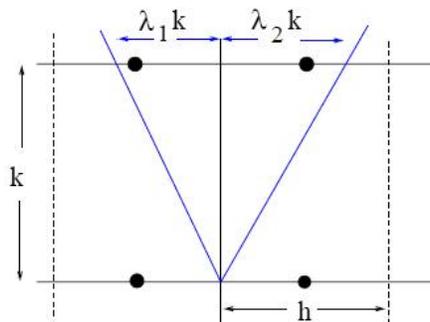


Figura A.4 – Condição CFL para o esquema de Godunov

3.1. O Método de Godunov para a Equação de Advecção Linear

Considere o problema local de Riemann, utilizando a condição inicial, à esquerda e à direita de $x_{j+1/2}$. Seja $\tilde{\mathbf{u}}^n(x, t)$ a solução da equação de advecção linear, ou seja,

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}^n(x, t)}{\partial t} + a \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}^n(x, t)}{\partial x} = 0 \quad \text{em } \mathbb{R}(t_n, t_{n+1})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}^n(x, t_n) = \begin{cases} U_j^n, & x < x_{j+1/2} \\ U_{j+1}^n, & x > x_{j+1/2} \end{cases}$$

Então,

$$\tilde{\mathbf{u}}^n(x, t) = \tilde{\mathbf{u}}^n\left(\left(x - x_{j+1/2} - a(t - t_n)\right), t_n\right)$$

Logo,

$$\mathbf{u}^*(U_j^n, U_{j+1}^n) \equiv \tilde{\mathbf{u}}^n(x_{j+1/2}, t) = \begin{cases} U_j^n, & a > 0 \\ U_{j+1}^n, & a < 0 \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

Fazendo $a^+ = \max(a, 0)$, $a^- = \min(a, 0)$. Como $a = a^+ + a^-$, de (A.20), obtemos a seguinte fórmula de discretização *upwind*:

$$F(U_j^n, U_{j+1}^n) = f(\mathbf{u}^*(U_j^n, U_{j+1}^n)) = a^+ U_j^n + a^- U_{j+1}^n \quad (\text{A.21})$$

A partir da de (A.21) definimos a seguinte nomenclatura:

Definição: Os termos upstream/upwind e downstream/downwind são definidos da seguinte maneira:

i) Para cada ponto x denotamos as direções a montante (ou *upwind*) e a jusante (ou *downwind*) na direção x , respectivamente como:

- direção a montante é a direção de $-a$ até x

- direção a jusante é a direção de $+a$ até x

Para a fronteira $x_{j+1/2}$ podemos definir nó a montante e nó a jusante, respectivamente como:

- nó a montante é o próximo nó na direção de $-a$, por exemplo, x_j para $a > 0$

- nó a jusante é o próximo nó na direção de $+a$, por exemplo, x_{j+1} para $a < 0$

A interpretação física do método de Godunov para a equação de advecção linear pode se traduzir da seguinte forma: o fluxo numérico $F(U_j^n, U_{j+1}^n) = f(\mathbf{u}^*(U_j^n, U_{j+1}^n))$ na fronteira de $x_{j+1/2}$ é obtido usando o valor $(\mathbf{u}^*(U_j^n, U_{j+1}^n))$ no nó upwind de $x_{j+1/2}$, isto é:

$$F(U_j^n, U_{j+1}^n) = f(\mathbf{u}^*(U_j^n, U_{j+1}^n)) = \begin{cases} aU_j^n, & a > 0 \\ aU_{j+1}^n, & a < 0 \end{cases}$$

De (A.21) e visto que $a = a^+ + a^-$, chega-se às seguintes relações alternativas:

$$\begin{aligned} F(U_j^n, U_{j+1}^n) &= (a - a^-)U_j^n + a^-U_{j+1}^n \\ &= aU_j^n + a^-(U_{j+1}^n - U_j^n) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

$$\begin{aligned} F(U_j^n, U_{j+1}^n) &= a^+U_j^n + (1 - a^+)U_{j+1}^n \\ &= aU_{j+1}^n - a^+(U_{j+1}^n - U_j^n) \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Usamos a segunda relação (A.23) para escrever $F(U_{j+1}^n, U_j^n)$ como:

$$F(U_{j+1}^n, U_j^n) = aU_j^n - a^+(U_j^n - U_{j+1}^n) \quad (\text{A.24})$$

Assim, de (A.22) e (A.23), o método de Godunov para a equação de advecção linear apresenta a seguinte forma:

$$\begin{aligned} U_j^{n+1} &= U_j^n - \frac{k}{h} [F(U_j^n, U_{j+1}^n) - F(U_{j-1}^n, U_j^n)] \\ &= U_j^n - \frac{k}{h} [a^-(U_{j+1}^n - U_j^n) + a^+(U_j^n - U_{j-1}^n)] \end{aligned}$$

3.4. Esquema de Roe

Como vimos, acima, o método de Godunov requer o conhecimento da solução exata do problema de Riemann na fronteira de cada célula, em cada passo de tempo. No entanto, mesmo que fosse possível resolver o problema de Riemann de forma exata, na prática isto seria computacionalmente muito custoso. Este fato sugere que se utilize algum método numérico que aproxime a solução do problema de Riemann através de técnicas computacionalmente menos dispendiosas. Desta forma, uma generalização para o método de Godunov consiste em substituir $\mathbf{u}^n(x, t)$ por uma solução aproximada $\tilde{\mathbf{u}}^n(x, t)$, que pode ser definida como a união de várias soluções aproximadas das soluções dos problemas de Riemann em cada fronteira da célula. Assim, uma vez determinada $\tilde{\mathbf{u}}^n$ em $[t_n, t_{n+1}]$, tomamos v_j^{n+1} como a média celular no tempo t_{n+1} , ou seja,

$$v_j^{n+1} = \frac{1}{h} \int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} \tilde{u}(x, t_{n+1}) dx$$

Tais soluções aproximadas dos problemas de Riemann são chamadas de Riemann “*solvers*” (ou aproximantes de Riemann).

O aproximante de Riemann mais conhecido atualmente se deve a Roe [20], cuja técnica consiste em determinar $\tilde{\mathbf{u}}(x, t)$, a solução aproximada do problema de Riemann, resolvendo a equação linear da lei de conservação ao invés de resolver o sistema não linear original. Desde a sua criação, este esquema tem sido não só refinado como aplicado a vários problemas físicos. Alguns autores, Einfeldt et al [55], desenvolveram algumas modificações ao esquema original para evitar o chamado problema de vacuum que ocorre próximo aos escoamentos de baixas densidades, Este método tem sido aplicado, também, em problemas de escoamento multifásico.

A proposta de Roe foi resolver o problema de Riemann de forma aproximada, utilizando a forma quasi-linear da lei de conservação, aplicando a regra da cadeia, ou seja,

$$\begin{aligned} \text{Forma conservativa : } & \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} = 0 \\ \text{Forma quasi-linear: } & \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0 \quad \text{com} \quad \mathbf{A}(\mathbf{u})_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial u_j} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Roe, então, substitui a matriz jacobiana em (A.25) por uma matriz constante, que depende dos estados $\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D$, definida por:

$$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D) \quad (\text{A.26})$$

que é uma função dos estados $\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D$, dando origem ao seguinte problema linear:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.27})$$

Desta forma, o problema de Riemann original é, então, substituído pelo problema de Riemann aproximado, que é um sistema linear com coeficientes constantes, isto é,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \hat{\mathbf{A}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} &= 0 \\ \mathbf{u}(x, 0) &= \begin{cases} \mathbf{u}_E, & \text{se } x < 0 \\ \mathbf{u}_D, & \text{se } x > 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

O problema acima é, assim, resolvido de forma exata, como visto no Capítulo 3, introduzindo as seguintes variáveis características:

$$\mathbf{s} = R^{-1} \mathbf{u} \quad , \quad s = (s_1, s_2, \dots, s_p)^T \quad (\text{A.29})$$

onde R é a matriz dos autovetores à direita de $\hat{\mathbf{A}}$. Desta forma, o sistema (A.27) pode ser desacoplado em p equações de advecção linear, isto é,

$$\frac{\partial s_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial s_i}{\partial x} = 0 \quad , \quad i = 1, 2, \dots, p$$

onde λ_i são os autovalores de $\hat{\mathbf{A}}$. Desta maneira, os dados iniciais, em função das variáveis características, passam a ser:

$$\mathbf{s}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{s}_E = R^{-1} \mathbf{u}_E = \begin{pmatrix} s_{E1} \\ s_{E2} \\ \cdot \\ s_{Ep} \end{pmatrix} & , \quad x < 0 \\ \mathbf{s}_D = R^{-1} \mathbf{u}_D = \begin{pmatrix} s_{D1} \\ s_{D2} \\ \cdot \\ s_{Dp} \end{pmatrix} & , \quad x > 0 \end{cases}$$

Logo,

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_D - \mathbf{u}_E &= R(s_D - s_E) = R \begin{pmatrix} s_{D1} - s_{E1} \\ \cdot \\ \cdot \\ s_{Dp} - s_{Ep} \end{pmatrix} \\ &= (s_{D1} - s_{E1})r_1 + \dots + (s_{Dp} - s_{Ep})r_p = \sum_{i=1}^p a_i r_i \end{aligned}$$

onde $a_i = s_{Di} - s_{Ei}$ e r_i são os autovetores à direita de \hat{A} . O estado intermediário na solução do problema de Riemann será dados por:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}_E + \sum_{\lambda_i < 0} a_i r_i \quad (\text{A.30})$$

Desta maneira, a função fluxo numérico é obtida da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D) &= \hat{A}\mathbf{u}^* = \hat{A}\mathbf{u}_E + \hat{A} \sum_{\lambda_i < 0} a_i r_i \\ &= \mathbf{f}(\mathbf{u}_E) + \sum_{\lambda_i < 0} \lambda_i a_i r_i \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Então, o esquema de Roe pode ser escrito na seguinte forma conservativa:

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\mathbf{f}(\mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_{j-1}^n, \mathbf{u}_j^n) \right] \quad (\text{A.32})$$

onde \mathbf{f} é calculada por (A.31).

Em resumo, este esquema consiste em substituir o problema de lei de conservação não linear original por um sistema linearizado com coeficientes constantes, mantendo-se, porém, os dados iniciais do problema.

A matriz \hat{A} , para um sistema geral, com m leis de conservação deve satisfazer as seguintes condições:

i) $\hat{A}(\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D)$ deve possuir autovalores reais. $\hat{\lambda}_i = \hat{\lambda}_i(\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D)$, tais que $\hat{\lambda}_1 \leq \hat{\lambda}_2 \leq \dots \leq \hat{\lambda}_m$ e um conjunto completo de autovetores à direita, linearmente independentes $\hat{k}_1, \hat{k}_2, \dots, \hat{k}_m$, tais que $\hat{A}\hat{k}_i = \hat{\lambda}_i\hat{k}_i$. Esta condição garante que o aproximante deve preservar as características matemáticas do sistema não linear original, ou seja, ele garante que o sistema seja hiperbólico.

ii) \hat{A} deve ser consistente com a matriz Jacobiana exata, isto é,

$$\hat{A}(\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D) \rightarrow A(\mathbf{u}) \quad (\text{A.33})$$

Esta condição é necessária para que seja possível recuperar o algoritmo linearizado a partir do algoritmo não linear.

iii) Conservação ao longo das descontinuidades, ou seja,

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}_D) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_E) = \hat{A}(\mathbf{u}_D, \mathbf{u}_E) \quad (\text{A.34})$$

Assumindo que a primeira condição seja satisfeita, esta condição garante que se os estados $\mathbf{u}_E, \mathbf{u}_D$ estão conectados por uma descontinuidade isolada, então o aproximante reconhece esta onda exatamente, ou seja, a solução do problema linearizado nos fornece a solução exata do problema de Riemann.

No caso de uma descontinuidade, a condição de Rankine-Hugoniot estabelece que:

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}_D) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_E) = s(\mathbf{u}_D, \mathbf{u}_E) \quad (\text{A.35})$$

onde s é a velocidade de propagação do choque ou da descontinuidade de contato.

Substituindo em (3.24), teremos que:

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}_D) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_E) = \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{u}_D, \mathbf{u}_E) = s(\mathbf{u}_D - \mathbf{u}_E) \quad (\text{A.36})$$

Isto mostra que $\mathbf{u}_D - \mathbf{u}_E$, neste caso, deve ser um autovetor de $\hat{\mathbf{A}}$ com autovalor s . Logo, a solução exata do aproximante do problema de Riemann também consiste deste salto $\mathbf{u}_D - \mathbf{u}_E$ que se propaga com velocidade s .