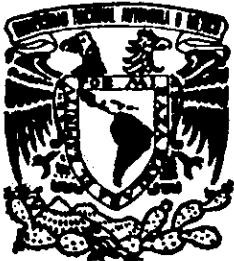


3
2 g/w



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

METODOS HIBRIDOS Y DE DESCOMPOSICION
DE ELEMENTO FINITO EN PROBLEMAS DE
ADVECCION-DIFUSION CON CONTROLES
DISTRIBUIDOS.

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
F I S I C O
P R E S E N T A:

TOMAS ALGABA ALGABA



Director de Tesis:

DR. GONZALO ALDUNCIN GONZALEZ
FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR

1998



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

259535



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: "METODOS HIBRIDOS Y DESCOMPOSICION DE ELEMENTO FINITO EN PROBLEMAS DE ADVECCION DIFUSION CON CONTROLES DISTRIBUIDOS"

realizado por TOMAS ALCALA VILLEGAS

con número de cuenta 7400767-7 , pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis	DR. GONZALO ALDUNCIN GONZALEZ
Propietario	DR. ALFREDO NICOLAS CARRIZOSA
Propietario	DR. PABLO PADILLA LONGORIA
Suplente	M. EN C. AUGUSTO CABRERA MANUEL
Suplente	DR. ENRIQUE BUENDIA CARRERA

E. Al.

Alf. Carrizosa

Pablo Padilla L.

Augusto Cabrera Manuel

Enrique Buendía Carrera

Consejo Departamental de Física

DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FISICA

R. Ruelas Mayorga

Jurado Asignado:

Propietario. Dr Gonzalo Alduncin González.

Director de Tesis

Instituto de Geofísica, U.N.A.M.

Propietario. Dr Alfredo Nicolás Carrizosa.

Departamento de Matemáticas, U.A.M.

Propietario. Dr Pablo Padila Longoria.

Instituto de Investigación en Matemáticas

Aplicadas y Sistemas, U.N.A.M.

Suplente. M. en C. Augusto Cabrera Manuel.

Facultad de Ciencias, U.N.A.M.

Suplente. Dr Enrique Buendia Carrera.

Centro de Ciencias de la Atmósfera, U.N.A.M.

Agradecimientos

A mis padres:

María Isabel Villegas García y José Natividad Alcalá Guzmán.

Su ejemplo de trabajo y cariño han sido para mi una orden en silencio.

A mi esposa:

Edna Edith Vargas García.

Compañera incondicional a lo largo de mi vida.

A mis amigos:

Gabriel Madrazo Monroy, (QPD), quién nunca usó palabras sinó hechos para demostrarme su amistad.

Ing. Lorenzo Hernández Reyca, a el le debo mi interés por la Física y las Matemáticas, excelente profesor y amigo.

A mi hermano:

Martín Alcalá Villegas.

Por sus constantes preguntas para saber cuando terminaba este trabajo.

A mi asesor:

Dr Gonzalo Alduncin González, sin su constante apoyo no hubiera conseguido finalizar este trabajo.

A todo ellos GRACIAS.

INDICE

Introducción

I) Modelo Físico

- 1.-Principio de balance de masa o energía en flujos
- 2.-Controles distribuidos
- 3.-Condiciones a la frontera en forma subdiferencial

II) Formulaciones Variacionales

- 4.-Dualización de controles
- 5.-Modelos primal y mixto

III) Método de Características para Advección Dominante

- 6.-El método de características

IV) Formulaciones MacroHíbridas

- 7.-Descomposición de dominios sin traslape

V) Discretización Espacial Mediante Elemento Finito

- 8.- Elemento finito lagrangiano
- 9.- Esquema de "upwind" de Tabata
- 10.-El método de elemento finito macrohíbrido y mixto
- 11.-Modelos semidiscretos macrohíbridos

VI) Esquemas Numéricos

- 12.-Esquema semiimplícito de Euler
- 13.-Interpretación del esquema semiimplícito de Euler como el algoritmo $ALGO_M$
- 14.-Un ejemplo modelo

VII) Modelos Computacionales

- 15.-Descripción del programa para computadora
- 16.-Experimentos numéricos y resultados

Conclusiones

Bibliografía

Código fuente

Introducción

La modelación matemática de problemas físicos y los métodos numéricos que se implementan para su solución, son uno de los retos más interesantes y complejos que se presentan en la ciencia.

El propósito de esta tesis es aplicar métodos de descomposición de operadros y de dominios a modelos de advección-difusión con controles distribuidos, con el fin de generar esquemas computacionales para su resolución numérica. La orientación de la tesis no es sobre análisis matemático, se citan las fuentes donde éste se encuentra realizado. El enfoque fundamental es sobre el algoritmo y su aplicación en situaciones prácticas. Problemas físicos que motivan y dan su importancia a este tipo de modelo son los de climatización en conducción de calor y de remediación de acuíferos contaminados entre otros.

Es importante resaltar que por la presencia del término advectivo, estos problemas no son potenciales, esto es, sus problemas estacionarios no son caracterizables por el mínimo de un potencial. Además la presencia de restricciones hace que el problema sea de naturaleza no lineal.

El modelo de advección-difusión tiene su importancia directa en fenómenos de transporte de energía y masa en flujos, siendo también de interés en los flujos mismos con advección dominante. En particular la simulación numérica de estos procesos requiere de métodos de estabilización debido a su carácter hiperbólico. Por otro lado, los problemas con restricciones en el campo primal corresponden a problemas de control distribuido, los cuales son modelables via desigualdades variacionales.

En la actualidad los métodos de mayor efectividad computacional para este tipo de modelos no lineales y no potenciales, son los métodos de descomposición de operadores y su combinación con técnica de elemento finito, los que producen formulaciones mixtas. Asimismo, para el tratamiento de problemas de gran escala, complejidad geométrica o de superficies de discontinuidad en propiedades físicas, los métodos de descomposición de dominios resultan ser de gran importancia.

En este estudio, en la formulación física de los modelos de control se aplicarán formulaciones subdiferenciales, las cuales corresponden a modelos locales variacionales de mecanismos de control de tipo monótono. Asimismo, la modelación de las formulaciones con descomposición de dominios sin traslapes, se realizará via ecuaciones subdiferenciales de transmisión de continuidades de interfase. Los métodos de estabilización serán de tipo "upwind" mediante un enfoque de características. En cuanto a los algoritmos de resolución numérica de los modelos macrohíbridos mixtos discretos de elemento finito resultantes, se utilizarán los métodos de resolventes que generalizan esquemas de lagrangianos aumentados y direcciones alternantes.

Como un resultado particular se llegará a la aplicación de los métodos antes mencionados a problemas modelo de climatización en conducción de calor, demostrándose la versatilidad de los mismos.

Para una geometría específica se generará un programa de cómputo para su experimentación numérica.

Una descripción del contenido de este trabajo es la siguiente:

- Se plantea un modelo físico y se introduce un control distribuido.
- Haciendo uso de la dualización de controles, obtenemos los modelos mixtos local y global.
- Se da un tratamiento a la advección dominante.
- Se desarrolla la descomposición de dominios.
- Se introduce la discretización de los dominios mediante elemento finito.
- Para resolver el sistema de ecuaciones se utilizará el algoritmo $ALGO_M$, usando el Teorema de Punto Próximo en la convergencia.
- El esquema teórico en su conjunto se aplica en un problema modelo mostrándose los resultados obtenidos.

I) Modelo Físico

Los fenómenos de transporte son aquellos procesos en los cuales hay una transferencia de materia o de energía.

Los rasgos físicos comunes de estos fenómenos se pueden describir con técnicas similares, estando caracterizados por una ecuación de transferencia, que en su forma general, se le conoce como la ecuación de advección-difusión.

En esta sección se deducirá dicha ecuación diferencial a partir del principio de conservación.

Los planteamientos del modelo físico y desarrollo de esta parte se dan de acuerdo al marco conceptual y teórico de la mecánica del continuo siguiendo el libro de M. Gurtin [Gu].

Por otro lado la formulación variacional subdiferencial local de los controles distribuidos, así como de las condiciones a la frontera, se presentan siguiendo la metodología subdiferencial propuesta en [A1].

Conceptos acerca de cálculo variacional y métodos en convexidad los podemos hallar en [Sm].

Otras fuentes consultadas en la tesis para la solución de ecuaciones diferenciales parciales usando el método de elemento finito fueron [Ca], [Gr], [Va].

Algunas de las situaciones reales donde se podrían aplicar los resultados de este trabajo son en modelos físicos como los siguientes : en la regulación de temperatura en los invernaderos o en sitios que requieran una climatización ambiental, así como en determinar la difusión de contaminantes en un líquido (un lago por ejemplo), aquí la variable representará la concentración del contaminante.

1.-Principio de balance de masa o energía en flujos

Consideremos la conducción de calor (o de masa) dentro de una región de flujo Ω_t en el tiempo $t \in (0, T)$ para un fluido. Sea u la temperatura, (o bién la concentración de soluto) en el fluido, Ω una configuración de referencia, f una fuente de energía (o masa). A través de la frontera $\partial\Omega_t$ vamos a tener flujos por unidad de superficie, caracterizados por un vector de flujo \mathbf{q} .

Partiendo del principio de balance, en cualquier parte $P_t \subset \Omega_t$, de la región ocupada por el fluido en el tiempo t , se tiene (asumiendo un calor específico unitario) (véase Fig. 1)

$$\frac{d}{dt} \int_{P_t} u \, dv = \int_{P_t} f \, dv - \int_{\partial P_t} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, da, \quad \forall P_t \subset \Omega_t.$$

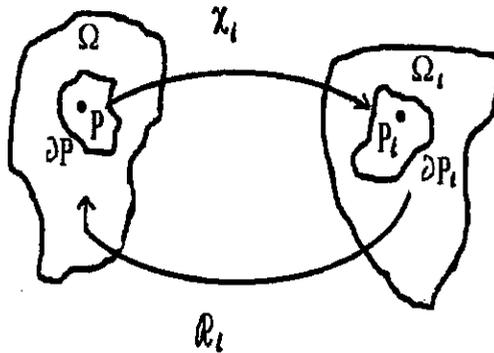


Fig. 1. El movimiento del fluido.

Aquí χ denota la función movimiento, siendo χ_t la deformación en el tiempo t . Con el propósito de realizar la diferenciación de la integral en el dominio móvil, se procede a expresar dicha integral en términos de la configuración de referencia. Para ello usaremos el campo escalar $u_m(p, t) = u(\chi_t(p), t)$, definido en $\Omega \times (0, T)$, llamado la descripción material de u . Por otro lado denotaremos por $\mathbf{F}(t; \cdot) = \nabla \chi_t$ al gradiente de deformación, cuyo determinante, $\det(\mathbf{F}) > 0$ representa el "cambio de volumen" por unidad de volumen.

Así pues, aplicando dichas ideas, y suponiendo que podemos intercambiar los procesos de derivación e integración, se sigue que

$$\frac{d}{dt} \int_{P_t} u \, dv = \frac{d}{dt} \int_P u_m \det(\mathbf{F}) \, dV = \int_P \left\{ \frac{\partial u_m}{\partial t} + u_m (\operatorname{div} \mathbf{w})_m \det(\mathbf{F}) \right\} dV,$$

donde se ha utilizado la relación, $\frac{\partial}{\partial t} \det(\mathbf{F}) = \det(\mathbf{F}) (\operatorname{div} \mathbf{w})_m$, con \mathbf{w} , la velocidad del fluido.

Finalmente aplicando el teorema de la divergencia y el teorema de localización, se obtiene la ecuación de balance local. Esto es, respecto a lo último, tomando el promedio de la expresión cuando el volumen de la región de integración se contrae a uno de sus puntos, mediante el correspondiente proceso de límite, se tiene

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} u_m \right)_e + u \operatorname{div} \mathbf{w} + \operatorname{div} \mathbf{q} = f \quad \text{en } \mathcal{T} = \{(x, t) : x \in \Omega_t, t \in (0, T)\},$$

donde \mathcal{T} denota la trayectoria en el intervalo $(0, T)$. También el subíndice "e" denota la descripción espacial de un campo material, i.e.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}u_m\right)_e(x, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t}u_m\right)(R_t(x), t) \quad \text{en } T,$$

siendo R_t la función de referencia (véase Fig. 1). Por tanto la derivada temporal material o derivada total $\frac{D}{Dt}$ resulta ser

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt}u(x, t) &= \frac{\partial}{\partial t}u_m(R_t(x), t) \\ &= \frac{\partial}{\partial t}u(x, t) + \underbrace{\mathbf{w}(x, t) \cdot \text{grad } u(x, t)}_{\text{término advectivo}}, \quad (x, t) \in T. \end{aligned}$$

término advectivo

Por consiguiente, la ecuación resultante es :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \text{grad } u + u \text{ div } \mathbf{w} + \text{div } \mathbf{q} = f \quad \text{en } T.$$

Para el caso de un fluido incompresible, $\text{div } \mathbf{v} = 0$, con lo cual se tiene la versión reducida de la ecuación local de balance

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \text{grad } u + \text{div } \mathbf{q} = f \quad \text{en } T.$$

Considerando la ecuación constitutiva entre u y q de tipo lineal, esto es, el Principio de Fourier en transferencia de calor,

$$q = -\epsilon K \text{ grad } u, \quad \text{con } \epsilon K = \text{tensor de conductividad,}$$

se concluye la ecuación:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + w \cdot \text{grad } u - \epsilon \text{ div } \{K \text{ grad } u\} = f. \quad \text{en } T. \quad (1)$$

Esta es la ecuación de advección-difusión a considerar en esta tesis.

2.-Controles distribuidos

Para considerar un “control interno para satisfacer una restricción”, tenemos que plantear el problema, en nuestro caso, de resolver el modelo de advección-difusión con restricciones (R) en el interior. En particular, buscaremos un posible control para la desigualdad siguiente:

$$(R) \left\{ \begin{array}{l} u(x, t) \leq c_s(x, t) \\ u(x, t) \geq c_i(x, t) \end{array} \right\} \quad \text{en } (x, t) \in \Omega \times (0, T) \\ (\Omega_t = \Omega \text{ dominio fijo en el tiempo})$$

donde,

$c_s(x, t)$ = la cota superior,

$c_i(x, t)$ = la cota inferior.

Además:

$Q \equiv \Omega \times (0, T)$,

f = la fuente prescrita en Q , que no tiene que ver con el control,

\bar{u} = el dato frontera tipo Dirichlet definido sobre $\Sigma_D = \partial\Omega_D \times (0, T)$

(la temperatura prescrita),

ϵg = el flujo prescrito sobre $\Sigma_N = \partial\Omega_N \times (0, T)$,

$\epsilon \mathbf{K}$ = el tensor de “conductividad del sistema” definido en Q ,

w = la velocidad del flujo del fluido en Q ,

u_0 = la condición inicial definida en Ω .

Entonces el problema es, determinar la fuente controlante f_c , definida en Q , para que la distribución de temperatura satisfaga la restricción (R), sujeta a las ecuaciones :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div} \{ \mathbf{K} \operatorname{grad} u \} + \mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u = f - f_c \quad \text{en } Q,$$

$$u = \hat{u} \text{ sobre } \Sigma_D,$$

$$-\epsilon \mathbf{K} \operatorname{grad} u \cdot \mathbf{n} = -\epsilon g \text{ sobre } \Sigma_N,$$

$$u(0) = u_0 \text{ en } \Omega.$$

Teniendo como incógnitas a u y f_c , para que el problema esté "bien planteado" se requiere incorporar un mecanismo de control, por ejemplo, de la forma:

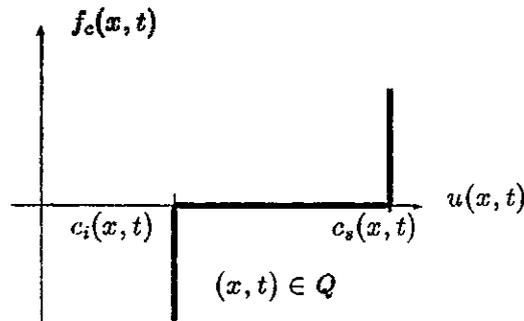


Fig. 2. Un mecanismo de control distribuido.

De esta manera se incorpora al modelo una relación entre la temperatura en Q y las posibles fuentes controlantes. En el ejemplo de la Fig. 2 la posible fuente controlante para temperaturas, en el interior del intervalo de admisibilidad, es unicamente de valor cero, y para temperaturas en los extremos del intervalo de admisibilidad las posibles fuentes son a priori desconocidas pero de signo positivo (respectivamente negativo) si la temperatura alcanza el valor permisible superior (respectivamente inferior).

Así, en general, la relación entre temperatura y posibles fuentes controlantes es una función multivaluada, no decreciente (es decir, monótona). Si denotamos ésta por $\partial\phi$, entonces, el mecanismo de la Fig. 2 queda expresado por:

para $(x, t) \in Q$,

$$f_c(x, t) \in \partial\phi(x, t; u(x, t)) = \begin{cases} (-\infty, 0] & , \quad u(x, t) = c_i(x, t), \\ \{0\} & , \quad c_i(x) < u(x, t) < c_s(x, t), \\ [0, +\infty) & , \quad u(x, t) = c_s(x, t), \\ \emptyset & , \quad \text{otro valor.} \end{cases}$$

A la función $\partial\Phi(x, t) : \mathbb{R} \rightarrow 2^{\mathbb{R}}$ se le llama un subdiferencial monótono, cuyos elementos $f_c(x, t)$ son denominados subgradientes.

Por lo tanto, despejando f_c obtenemos la ecuación multivaluada

$$\frac{-\partial u}{\partial t} + \epsilon \operatorname{div} \{ \mathbf{K} \operatorname{grad} u \} - \mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u + f \in \partial\phi(u) \quad \text{en } Q. \quad (2)$$

Esta es la ecuación de calor con mecanismo de control distribuido.

3.-Condiciones a la frontera en forma subdiferencial

En la sección anterior se vio que la ecuación subdiferencial $f_c(x, t) \in \partial\phi(x, t; u(x, t))$ en Q modela un mecanismo de control distribuido que relaciona la temperatura y las posibles fuentes controlantes. Similarmente, mecanismos de control a la frontera podrían ser caracterizados en su relación a restricciones de valores frontera de la temperatura y flujos de calor.

En este trabajo, sólo consideraremos condiciones a la frontera, ya sean del tipo temperatura prescrita (Dirichlet) o de tipo flujo prescrito (Neumann). Podemos, en forma general, expresarlas como :

$$\gamma u(x, t) \in \mathcal{D}(\Psi(x, t); \cdot) : -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x, t) \in \partial\psi(x, t; \gamma u(x, t)), \quad (x, t) \in \Sigma. \quad (3)$$

Aquí, $\Sigma = \partial\Omega \times (0, T)$, γu = la traza (valor Dirichlet) del campo primal u en la frontera del dominio, $\partial\Omega$, y $\frac{\partial u}{\partial \nu}$ = el flujo (valor Neumann) correspondiente. También $\mathcal{D}(\Psi(x, t; \cdot)) \subset R$ es el conjunto de trazas admisibles, $\partial\Psi(x, t; \cdot) : R \rightarrow 2^R$ es un subdiferencial monótono cuyos subgradiantes,

$$-\frac{\partial u}{\partial \nu}(x, t) = -\epsilon \mathbf{K}(x) \text{ grad } u(x, t) \cdot \mathbf{n}(x),$$

corresponden a los posibles valores del flujo normal a través de la frontera $\partial\Omega$.

En particular supondremos que una condición Dirichlet de frontera, \hat{u} , es prescrita en una parte de la frontera $\partial\Omega_D$, con lo cual la Ec. (3) toma la forma (véase Fig. 3):

$$\begin{aligned} \gamma u(x, t) \in \mathcal{D}(\psi_D(x, t); \cdot) = \{\hat{u}(x, t)\} : -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x, t) \in \partial \psi_D(x, t; \gamma u(x, t)) = R, \\ (x, t) \in \Sigma_D = \partial \Omega_D \times (0, T). \end{aligned} \quad (3_D)$$

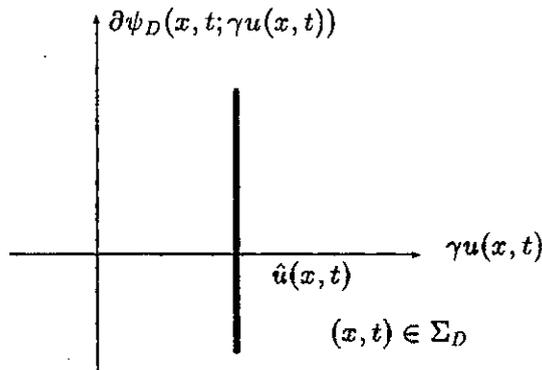


Fig. 3. Un mecanismo de control tipo Dirichlet.

Además, que una condición de frontera Neumann, $\epsilon \hat{g}$, es prescrita en otra parte de la frontera $\partial \Omega_N$, complementaria teniéndose entonces (véase Fig. 4)

$$\begin{aligned} \gamma u(x, t) \in \mathcal{D}(\psi_N(x, t; \cdot)) = R : -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x, t) \in \partial \psi_N(x; \gamma u(x, t)) = \{\epsilon \hat{g}(x, t)\}, \\ (x, t) \in \Sigma_N = \partial \Omega_N \times (0, T). \end{aligned} \quad (3_N)$$

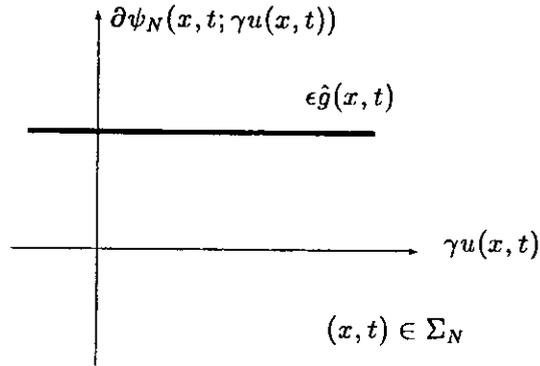


Fig. 4. Un mecanismo de control tipo Neumann.

Aquí es importante hacer resaltar el hecho de que el flujo normal $\frac{\partial u}{\partial \nu}$ en la ecuación (3_D) y que la traza $\gamma u(x)$ en la ecuación (3_N) aparecen respectivamente como condiciones de frontera complementarias y que son a priori desconocidas.

II) Formulaciones Variacionales

En el estudio de las ecuaciones diferenciales con valores a la frontera, una de las mejores alternativas que se tienen para su análisis y su aproximación, es llegar a expresarlas en forma variacional global.

Durante las siguientes secciones construiremos paso a paso las formulaciones variacionales del problema. Hasta aquí tenemos expresadas las restricciones internas y las condiciones a la frontera en forma subdiferencial, por lo que uno de los siguientes pasos es dualizar. Específicamente se elige dualizar el control interno, usando para ello la gráfica inversa del módulo, lo que completa las formulaciones variacionales locales. De aquí es prácticamente directo llegar a las formulaciones globales.

En esta parte el proceso de la dualización subdiferencial se realiza siguiendo [A1], como se mencionó, via inversión. Las formulaciones variacionales globales tanto primal como mixta se construyen de acuerdo a la misma referencia [A1], (véase también [A2]).

4.-Dualización de controles

Usando el método subdiferencial, procederemos a dualizar las restricciones de control, via las gráficas inversas de sus subdiferenciales. Esto es, para $j : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$, una función propia convexa y semicontinua inferiormente con subdiferencial $\partial j : R \rightarrow 2^R$, aplicaremos la equivalencia :

$$q \in \mathcal{D}(j) : q^* \in \partial j(q) \Leftrightarrow q^* \in \mathcal{D}(j^*) : q \in \partial j^*(q^*), \quad (4)$$

donde $\partial j^* : R \rightarrow 2^R$ es el subdiferencial monótono de j^* , la función conjugada (o dual) de j definida por

$$j^*(q^*) = \sup_{q \in R} \{q^*q - j(q)\}, \quad q^* \in R. \quad (5)$$

Así, denotando $p^* = f_c$ y utilizando la caracterización (4), la formulación dual subdiferencial de la ecuación de control está dada por

$$p^*(x, t) \in \mathcal{D}(\phi^*(x, t; \cdot)) : u(x, t) \in \partial \phi^*(x, t; p^*(x, t)), \quad (x, t) \text{ en } Q, \quad (6)$$

donde $\partial \phi^* : R \rightarrow 2^R$ es el subdiferencial monótono de ϕ^* , (el superpotencial conjugado).

Tenemos así que, para el ejemplo dado, (véanse Fig. 5 y Fig. 6)

$$p^*(x, t) \in \mathcal{D}(\phi^*(x, t; \cdot)) = R :$$

$$u(x, t) \in \partial\phi^*(x, t; p^*(x, t)) = \begin{cases} \{c_i(x, t)\} & , p^*(x, t) < 0, \\ [c_i(x, t), c_s(x, t)] & , p^*(x, t) = 0, \\ \{c_s(x, t)\} & , p^*(x, t) > 0, \end{cases}$$

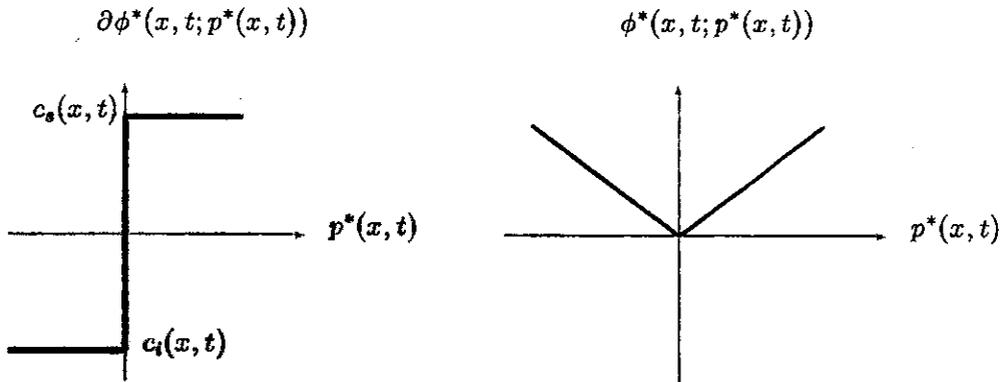


Fig. 5 y Fig. 6. El dual del mecanismo de control de la Fig. 2.

con superpotencial dual

$$\phi^*(x, t; p^*(x, t)) = \begin{cases} c_i(x, t)p^*(x, t) & , p^*(x, t) \leq 0, \\ c_s(x, t)p^*(x, t) & , p^*(x, t) \geq 0. \end{cases}$$

De la misma manera, podríamos haber dualizado las condiciones de frontera de Dirichlet y de Neumann, pero en este trabajo no será nuestra intención hacerlo.

5.-Modelos primal y mixto

Encontrar la solución de la ecuación diferencial de advección-difusión, es equivalente a buscar la solución del problema variacional asociado (con cierta regularidad). Con base en el orden del operador elíptico del modelo, se identifica un subconjunto de un espacio de Hilbert, $K(\Omega) \subset V(\Omega)$, que define el conjunto de campos solución admisibles. El espacio $V(\Omega)$ es un espacio denso y continuamente encajado en el espacio pivote $L^2(\Omega)$ constituido por funciones de cuadrado integrable (en el sentido de Lebesgue). Así el marco funcional para las formulaciones variacionales del problema queda establecido.

La utilidad primera que nos reporta el pasar a las expresiones variacionales globales es la realización del análisis cualitativo que estudia la unicidad, regularidad y existencia de las soluciones.

El proceso a seguir es, una vez expresadas las ecuaciones sub-diferenciales como desigualdades variacionales, integrar en los dominios respectivos, usar la correspondiente fórmula de Green, y conjuntar expresiones afines. Así las formulaciones primal, y mixta son obtenidas.

Es importante observar que el proceso de dualización para formulaciones mixtas descompone el problema original no lineal en subproblemas acoplados más simples: en nuestro caso, en uno lineal primal y otro dual no lineal. Es precisamente esta una de las posibles técnicas de descomposición en la modelación matemática, denominada descomposición de operadores.

Formulación variacional primal.

Necesitamos hallar un campo admisible $u(x, t) \in \mathcal{D}(\phi(x, t; \cdot))$, $(x, t) \in Q$, que cumpla con las restricciones del control, y busquemos además un subgradiente $p^*(x, t) \in \partial\phi(x, t; u(x, t))$ como fuente de control a priori desconocida, que satisfaga la ecuación de advección-difusión:

$$p^*(x, t) = -\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - w(x, t) \cdot \text{grad } u(x, t) \\ + \epsilon \text{ div } \{K(x) \text{ grad } u(x, t)\} + f(x, t) \in \partial\phi(x, t; u(x, t)), \quad (x, t) \in Q.$$

Usando la definición de subdiferencial :

$$\partial\phi(x, t; u(x, t)) = \{q^* \in R : \phi(x, t; \xi) \geq \phi(x, t; u(x, t)) \\ + q^* \{\xi - u(x, t)\}, \forall \xi \in \mathcal{D}(\phi(x, t; \cdot))\}, \quad (7)$$

donde $\mathcal{D}(\phi(x, t; \cdot)) = \{\xi \in R : \phi(x, t; \xi) < +\infty\}$ es el dominio efectivo de $\phi(x, t; \cdot)$, la ecuación de advección-difusión tiene asociada la siguiente desigualdad variacional: con $u(x, t) \in \mathcal{D}(\phi(x, t; \cdot))$,

$$\left\{ \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \epsilon \text{ div } \{K(x) \text{ grad } u(x, t)\} + w \cdot \text{grad } u(x, t) \right\} \{v(x) - u(x, t)\} \\ + \phi(x, t; v(x)) - \phi(x, t; u(x, t)) \\ \geq f(x, t) \{v(x) - u(x, t)\}, \quad \forall v(x) \in \mathcal{D}(\phi(x, t; \cdot)). \quad (8c)$$

Asimismo, las condiciones a la frontera Dirichlet y Neumann, cuyas ecuaciones subdiferenciales están dadas por (3_D) y (3_N) tienen como desigualdades variacionales las siguientes:

$$\gamma u(x, t) \in \{ \hat{u}(x, t) \} : 0 \geq -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x, t) \{ \gamma v(x) - \gamma u(x, t) \},$$

$$\forall v(x) \in \{ \hat{u}(x, t) \}, (x, t) \in \Sigma_D; \quad (8_D)$$

$$\begin{aligned} \gamma u(x, t) \in R : \epsilon \hat{g}(x, t) \gamma v(x, t) &\geq \epsilon \hat{g}(x, t) \gamma u(x, t) \\ -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x, t) \{ \gamma v(x) - \gamma u(x, t) \}, \forall v(x) \in R, (x, t) \in \Sigma_N. &\quad (8_N) \end{aligned}$$

Suponiendo suficiente regularidad en los datos del problema (en el sentido de espacios de Sobolev ([Cl],[Gl]))

Su formulación primal se sigue de las desigualdades (8) via integración por partes.

Entonces debemos encontrar $u(t) \in K_t$ tal que cumpla, para cada $t \in (0, T)$,

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t}(t) \{v - u(t)\} d\Omega + \epsilon \int_{\Omega} \mathbf{K} \text{ grad } u(t) \cdot \{\text{grad } v - \text{grad } u(t)\} d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \text{grad } u(t) \{v - u(t)\} d\Omega + \int_{\Omega} \phi(t; v) d\Omega - \int_{\Omega} \phi(t; u(t)) d\Omega \\ & \geq \int_{\Omega} f(t) \{v - u(t)\} d\Omega - \epsilon \int_{\partial\Omega_N} \hat{g}(t) \{\gamma v - \gamma u(t)\} d\partial\Omega, \quad \forall v \in K_t, \quad (9) \end{aligned}$$

donde K_t es la familia de campos primales admisibles, que satisfacen la restricción de control interno (R) así como la condición de frontera de Dirichlet. Esto es,

$$K_t = \{v \in H^1(\Omega) : v(x) \in \mathcal{D}(\phi(x, t; \cdot)), x \in \Omega, \gamma v(x) = \hat{u}(x, t), x \in \partial\Omega_D\}. \quad (10)$$

Aquí, $H^1(\Omega)$ denota el espacio de Hilbert de Sobolev de funciones cuadráticamente integrables junto con sus gradientes en Ω , esto es, si $v \in H^1(\Omega)$, entonces $v \in L^2(\Omega)$ y $\text{grad } v \in L^2(\Omega)$. A fin de garantizar la existencia y unicidad del problema primal, y tomando en cuenta la regularidad de los datos, supondremos que el campo de velocidad w satisface la condición de compatibilidad sobre la frontera Neumann,

$$\mathbf{w}(x, t) \cdot \mathbf{n}(x) \geq 0, \quad x \in \partial\Omega_N.$$

Esto es, la frontera de Neumann es una frontera de flujo saliente. Entonces la forma bilineal (no simétrica) del problema es coerciva.

Resumiendo se tienen dos ecuaciones con dos incognitas: en (11'), u , mientras que en (12'), p^* . Los conjuntos de campos admisibles se definen de la siguiente manera:

$$K_{\hat{u}(t)} = \{v \in H^1(\Omega) : \gamma v(x) = \hat{u}(x, t), x \in \partial\Omega_D\} \text{ (primal)}, \quad (13)$$

$$C_t = \{q^* \in L^2(\Omega) : q^*(x) \in \mathcal{D}(\phi^*(x, t; \cdot)), x \in \Omega\} \text{ (dual)}. \quad (14)$$

Podemos usar el hecho de que, $v = u \mp v_0 \in K_{\hat{u}(x,t)}$, $\forall v_0 \in K_0$, y viceversa, $v_0 = v - u \in K_0 \forall v \in K_{\hat{u}(x,t)}$, con lo que la desigualdad variacional primal (11') es equivalente a la igualdad variacional:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t}(t) v_0 d\Omega + \epsilon \int_{\Omega} \mathbf{K} \text{ grad } u(t) \cdot \text{grad } v_0 d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \text{grad } u(t) v_0 d\Omega \\ & = \int_{\Omega} \{f(t) - p^*(t)\} v_0 d\Omega - \epsilon \int_{\partial\Omega_N} g(t) \gamma v_0 d\partial\Omega \quad \forall v_0 \in K_0. \end{aligned} \quad (11'')$$

Aquí, $K_0 = \{v \in H^1(\Omega), \gamma v = 0 \text{ sobre } \partial\Omega_D\}$. En esta forma es que la igualdad variacional estandar es recuperada.

Como se observó al principio, el proceso de dualización de las restricciones internas ha descompuesto al problema original primal no lineal, en dos problemas acoplados: un problema primal lineal y otro dual no lineal.

Es precisamente con esta estructura primal y mixta que se construirán los esquemas de elemento finito de acuerdo a las técnicas que se detallarán en las secciones 8 y 10.

III) Método de Características para Advección Dominante

El método de características se usa aquí para transformar la ecuación diferencial de advección-difusión espacial en una ecuación material. Para lo anterior se utiliza la derivada total, integrándose paso a paso en el tiempo mediante el esquema semiimplícito de Euler.

El proceso anterior coincide con el esquema numérico de “upwind” de Tabata, que aproxima el término advectivo de la ecuación diferencial cuando la advección domina a la difusión, y estabiliza los modelos discretos de elemento finito.

Las referencias básicas de los planteamientos aquí tratados son en lo relativo al métodos de características, [Pi]. En cuanto al método “upwind” de Tabata se tiene el artículo [Ta], y para la interpretación del método de estabilidad de Tabata con el de características, los artículos de [BeDu1] y [BeDu2].

Formulación variacional mixta.

Procediendo igual que arriba, de las desigualdades variacionales primales de frontera (δ_D) y (δ_N), de la ecuación primal

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \epsilon \operatorname{div} \{ \mathbf{K}(x) \operatorname{grad} u(x, t) \} + \mathbf{w}(x, t) \cdot \operatorname{grad} u(x, t) = \\ \{ f(x, t) - p^*(x, t) \}, \quad \forall (x, t) \in Q. \end{aligned} \quad (11)$$

y de la desigualdad variacional dual

$$\begin{aligned} p^*(x, t) \in \mathcal{D}(\phi^*(x)(x, t; \cdot)) : \phi^*(x, t; q^*(x)) \geq \\ \phi^*(x, t; p^*(x, t)) + u \{ q^*(x) - p^*(x, t) \}, \quad \forall q^*(x) \in \mathcal{D}(\phi(x, t; \cdot)), \end{aligned} \quad (12)$$

se obtiene la siguiente formulación mixta del problema con control dualizado:

Encontrar $u(t) \in K_{\hat{u}(t)}$ y $p^*(t) \in C_t$ tales que, para $t \in (0, T)$,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t}(t) \{ v - u(t) \} d\Omega + \epsilon \int_{\Omega} \mathbf{K} \operatorname{grad} u(t) \cdot \{ \operatorname{grad} v - \operatorname{grad} u(t) \} d\Omega \\ + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u(t) \{ v - u(t) \} d\Omega \geq \int_{\Omega} \{ f(t) - p^*(t) \} \{ v - u(t) \} d\Omega \\ - \epsilon \int_{\partial\Omega_N} \hat{g}(t) \{ \gamma v - \gamma u(t) \} d\partial\Omega, \quad \forall v \in K_{\hat{u}(t)} \end{aligned} \quad (11')$$

$$\int_{\Omega} \phi^*(t)(q^*) d\Omega - \int_{\Omega} \phi^*(t)(p^*(t)) d\Omega \geq \int_{\Omega} u(t) \{ q^* - p^*(t) \} d\Omega, \quad \forall q^* \in C_t. \quad (12')$$

Resumiendo se tienen dos ecuaciones con dos incógnitas: en (11'), u , mientras que en (12'), p^* . Los conjuntos de campos admisibles se definen de la siguiente manera:

$$K_{\hat{u}(t)} = \{v \in H^1(\Omega) : \gamma v(x) = \hat{u}(x, t), x \in \partial\Omega_D\} \text{ (primal)}, \quad (13)$$

$$C_t = \{q^* \in L^2(\Omega) : q^*(x) \in \mathcal{D}(\phi^*(x, t; \cdot)), x \in \Omega\} \text{ (dual)}. \quad (14)$$

Podemos usar el hecho de que, $v = u \mp v_0 \in K_{\hat{u}(x,t)}$, $\forall v_0 \in K_0$, y viceversa, $v_0 = v - u \in K_0 \forall v \in K_{\hat{u}(x,t)}$, con lo que la desigualdad variacional primal (11') es equivalente a la igualdad variacional:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t}(t) v_0 d\Omega + \epsilon \int_{\Omega} \mathbf{K} \text{ grad } u(t) \cdot \text{ grad } v_0 d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \text{ grad } u(t) v_0 d\Omega \\ & = \int_{\Omega} \{f(t) - p^*(t)\} v_0 d\Omega - \epsilon \int_{\partial\Omega_N} g(t) \gamma v_0 d\partial\Omega \quad \forall v_0 \in K_0. \end{aligned} \quad (11'')$$

Aquí, $K_0 = \{v \in H^1(\Omega), \gamma v = 0 \text{ sobre } \partial\Omega_D\}$. En esta forma es que la igualdad variacional estandar es recuperada.

Como se observó al principio, el proceso de dualización de las restricciones internas ha descompuesto al problema original primal no lineal, en dos problemas acoplados: un problema primal lineal y otro dual no lineal.

Es precisamente con esta estructura primal y mixta que se construirán los esquemas de elemento finito de acuerdo a las técnicas que se detallarán en las secciones 8 y 10.

III) Método de Características para Advección Dominante

El método de características se usa aquí para transformar la ecuación diferencial de advección-difusión espacial en una ecuación material. Para lo anterior se utiliza la derivada total, integrándose paso a paso en el tiempo mediante el esquema semiimplícito de Euler.

El proceso anterior coincide con el esquema numérico de “upwind” de Tabata, que aproxima el término advectivo de la ecuación diferencial cuando la advección domina a la difusión, y estabiliza los modelos discretos de elemento finito.

Las referencias básicas de los planteamientos aquí tratados son en lo relativo al métodos de características, [Pi]. En cuanto al método “upwind” de Tabata se tiene el artículo [Ta], y para la interpretación del método de estabilidad de Tabata con el de características, los artículos de [BeDu1] y [BeDu2].

6.-El método de características

Para valores elevados del número de Peclet $Pe_h = \frac{h}{\epsilon}$, donde h es el parámetro de malla y ϵ el parámetro que pondera la difusión, (véase sección 9), cuando $\epsilon \rightarrow 0$ y h es fijo, el término advectivo domina al difusivo y aparecen inestabilidades en el esquema clásico primal de elemento finito. Para evitar este problema, se tiene la alternativa de aplicar la técnica llamada "upwind"

al término advectivo, de la ecuación

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \underbrace{\mathbf{w} \cdot \text{grad } u}_{\text{término advectivo}} - \epsilon \text{div} \{ \mathbf{K} \text{ grad } u \} = f.$$

término advectivo

Aquí presentamos el enfoque de características que permite generar esquemas "upwind" vía integración numérica en el tiempo.

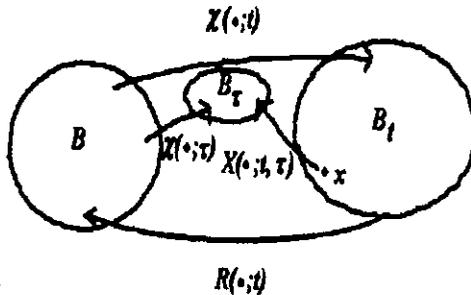


Fig. 7 Esquema con tiempo regresivo.

Consideremos entonces, el problema de la ecuación de advección-difusión en un flujo, no necesariamente estacionario,

$$\underbrace{\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + w(x, t) \cdot \text{grad } u(x, t) - \epsilon \text{ div } \{K(x) \text{ grad } u(x, t)\}}_{\text{derivada material}} = f(x, t). \quad (16)$$

Podemos entonces, identificar a los dos primeros términos con la derivada material en el tiempo del campo espacial primal u .

En la Fig. 7, χ es el movimiento del fluido, R su función de referencia y X es una función de referencia intermedia.

Utilizaremos el siguiente:

Teorema. *La función de referencia intermedia X satisface el problema de Cauchy de regresión (PCR), para $(x, t) \in \tau$ fijos:*

$$(PCR) \begin{cases} \frac{d}{d\tau} X(x, t; \tau) = w(X(x, t; \tau), \tau), \tau < t, \\ X(x, t; t) = x. \end{cases}$$

Utilizaremos también, la interpretación de la derivada material de u en el tiempo t :

$$\dot{u}(x, t) = \frac{\partial}{\partial \tau} u(X(x, t; \tau), \tau) |_{\tau=t}. \quad (17)$$

La demostración del teorema es como sigue:

$$X(\cdot; t; \tau) = \chi(\cdot; \tau) \circ R(\cdot; t) \quad (18)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} X(x, t, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} \chi(R(x, t, \tau)) = \dot{\chi}(R(x, t, \tau)) = \mathbf{w}(\chi(R(x, t, \tau)), \tau) \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} u(X(x, t, \tau), \tau) = u'(X(x, t, \tau), \tau) + \text{grad } u(X(x, t, \tau), \tau) \cdot \frac{\partial}{\partial t} X(x, t, \tau) \quad (20)$$

Observemos que, para $(x, t) \in \tau$ fijo, $X(x, t; \cdot)$ corresponde a la órbita o línea característica del punto material que ocupa la posición x en el tiempo t .

Así, podemos reescribir la ecuación (16) en término del tiempo regresivo como sigue:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} u(X(x, t; \tau), \tau) - \epsilon \text{ div} \{ \mathbf{K}(X(x, t; \tau)) \text{ grad } u(X(x, t; \tau), \tau) \} = \\ f(X(x, t; \tau), \tau). \end{aligned} \quad (21)$$

Ahora podemos aplicar el esquema implícito de Euler en el tiempo de la siguiente manera, $t = t^{m+1} = (m+1)\Delta t$

$$\frac{u(x, t^{m+1}) - u(X(x, t^{m+1}, t^m), t^m)}{\Delta t} - \epsilon \text{ div} \{ \mathbf{K}(x) \text{ grad } u(x, t^{m+1}) \} = f(x, t^{m+1}), \quad (22)$$

donde $X(x, t^{m+1}; \cdot)$ satisface el problema (PCR).

De esta manera se tiene una forma para tratar el término advectivo. En la sección 9 se verá una forma específica de introducir este resultado en la solución de la ecuación de advección-difusión, via su interpretación como esquema "upwind".

IV) Formulaciones Macrohíbridas

El objetivo fundamental de los métodos de descomposición de dominios es la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales en geometrias complejas, así como de gran escala. Estos consisten, en primer término, en la descomposición (separación) del dominio espacial del problema en subdominios más simples, dándose lugar a soluciones locales más sencillas, las cuales son conectadas via el uso de algoritmos eficientes en las interfases.

Así las técnicas de descomposición de dominios son útiles debido a que se pueden mezclar esquemas de soluciones directas e iterativas, usadas a nivel de subdominio y esquemas de transmisión iterativa a nivel interface. Además, su aplicación es ideal en las computadoras modernas debido al paralelismo intrínseco de sus algoritmos y la adecuada localización de los datos asociados.

Por las ventajas antes citadas, se tiene un auge en publicaciones de cómputo científico relacionadas a este tema, y cada año, desde 1987 se vienen realizando los Simposios Internacionales de Métodos en Descomposición de Dominios, promovidos por Roland Glowinski [DD1]...[DD8].

Para el problema de la ecuación de advección-difusión consideraremos la formulación de descomposición de dominios mediante técnicas de subdiferenciales, [A1]. El proceso desarrollado es el de considerar las restricciones de continuidad, a través de las interfases, inducidas por una descomposición de dominios sin traslapes, en términos de ecuaciones subdiferenciales (véase [A4] y [A5]).

De hecho, la idea básica de estas formulaciones, que en la actualidad se denominan macrohíbridas, fué planteada en el contexto de problemas potenciales en [A3]. Algunos trabajos sobre este tema para problemas lineales son [Br], [Le], [Ag]. Aplicaciones a problemas no lineales se tienen en [A6].

7.-Descomposición de dominios sin traslape

Consideremos una descomposición del dominio espacial Ω de nuestro problema físico en subdominios disjuntos y conexos:

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{e=1}^E \bar{\Omega}_e, \quad \Omega_e \cap \Omega_f = \emptyset \quad \forall 1 \leq e < f \leq E, \quad (29)$$

con fronteras internas e interfases definidas por

$$\Gamma_e = \partial\Omega_e \cap \Omega, \quad \Gamma_{ef} = \Gamma_e \cap \Gamma_f, \quad 1 \leq e < f \leq E. \quad (30)$$

De acuerdo al operador elíptico del problema, para $e = 1, 2, \dots, E$, sea $V(\Omega_e)$ el espacio primal local, el cuál en general es un espacio reflexivo de Banach que está denso y continuamente embebido en el espacio pivote $L^2(\Omega_e)$, y sean $B(\Gamma_e)$ y $B'(\Gamma_e)$ los correspondientes espacios de valores Dirichlet y Neumann. Entonces denotando por $\gamma_e : V(\Omega_e) \rightarrow B(\Gamma_e)$ y $\delta_e : V(\Omega_e) \rightarrow B'(\Gamma_e)$ los operadores traza Dirichlet y Neumann, las condiciones de transmisión de continuidad a lo largo de las interfases para un campo primal

$$u = \{u_e\} \in \prod_{e=1}^E V(\Omega_e) \text{ están dadas por}$$

$$\{\gamma_e u_e\} \in Q_D \text{ y } -\{\delta_e u_e\} \in Q_N^*, \quad (31)$$

donde Q_D y Q_N^* son los subespacios de admisibilidad, definidos por

$$Q_D = \{\{v_e\} \in \prod_{e=1}^E B(\Gamma_e) : v_e = v_f \text{ en } \Gamma_{ef}, 1 \leq e < f \leq E\}, \quad (32)$$

$$Q_N^* = \{\{v_e^*\} \in \prod_{e=1}^E B'(\Gamma_e) : v_e^* = -v_f^* \text{ en } \Gamma_{ef}, 1 \leq e < f \leq E\}. \quad (33)$$

Trabajaremos de acuerdo a el lema siguiente:

Lema 1 *Las restricciones de transmisión (31) son modeladas por las ecuaciones subdiferenciales, equivalentes entre si, primal y dual, esto es*

$$-\{\delta_e(u_e)\} \in \partial I_{Q_D}(\{\gamma_e u_e\}) \iff \{\gamma_e u_e\} \in \partial I_{Q_N}(-\{\delta_e(u_e)\}), \quad (34)$$

donde I_{Q_D} y I_{Q_N} son los funcionales indicatrices de los subespacios de transmisión de Dirichlet y de Neumann respectivamente.

Demostración: El resultado se obtiene por dualidad, observando que el funcional conjugado $(I_{Q_D})^* = I_{Q_N}$ y recordando que la gráfica inversa de un subdiferencial monótono es la gráfica del subdiferencial del correspondiente superpotencial conjugado. \square

Por lo tanto, en la modelación local subdiferencial de problemas con restricciones, donde éstas son dualizadas para separar la estructura de operadores, es natural incorporar condiciones de transmisión en interfaces debidas a descomposición de dominios sin traslape, de acuerdo al lema 1, usando el modelo local siguiente:

$$\text{Transmission} = \begin{cases} -\delta_e(u_e) = g_e^* & , \text{ en } \Gamma_e, 1 \leq e \leq E, \\ \{\gamma_e u_e\} \in \partial I_{Q_N}(\{g_e^*\}) \end{cases}$$

Ahora tenemos un nuevo campo dual denotado como $\{g_e^*\} \in \prod_{e=1}^E B'(\Gamma_e)$ de los valores de interfase tipo Neumann.

Así, retomando las ecuaciones primal (9) y mixtas (11),(12) de la sección 5, la formulación macrohíbrida del problema de advección-difusión corresponde a encontrar para el primal

$u_e \in K_t(\Omega_e)$, tal que, para $1 \leq e \leq E$:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_e} \frac{\partial u_e}{\partial t}(t) \{v - u_e(t)\} d\Omega + \epsilon \int_{\Omega_e} \mathbf{K} \text{grad } u_e(t) \cdot \{\text{grad } v - \text{grad } u_e(t)\} d\Omega \\ & + \int_{\Omega_e} \mathbf{w}(t) \cdot \text{grad } u_e(t) \{v - u_e(t)\} d\Omega + \int_{\Omega_e} \phi(t; v) d\Omega - \int_{\Omega_e} \phi(t; u_e(t)) d\Omega \\ & \geq \int_{\Omega_e} f(t) \{v - u_e(t)\} d\Omega - \epsilon \int_{\partial\Omega_e \cap \partial\Omega_N} \hat{g}(t) \{\gamma v - \gamma u_e(t)\} d\partial\Omega \\ & - \int_{\Gamma_e} g_e^*(t) \{\gamma v - \gamma u_e(t)\} d\Gamma, \forall v \in K_t(\Omega_e), \end{aligned}$$

y para el mixto

$u_e \in K_{\hat{u}}(t)(\Omega_e)$ y $p_e \in C_t(\Omega_e)$, tales que, para $1 \leq e \leq E$:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_e} \frac{\partial u_e}{\partial t}(t) v d\Omega + \epsilon \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e \nabla u_e(t) \cdot \nabla v d\Omega + \int_{\Omega_e} \mathbf{w}_e \cdot \nabla u_e(t) v d\Omega \\ & = \int_{\Omega_e} \{f(t) - p_e^*(t)\} v d\Omega - \epsilon \int_{\partial\Omega_e \cap \partial\Omega_N} \hat{g}_e(t) \gamma v d\partial\Omega \\ & - \int_{\Gamma_e} g_e^*(t) \gamma v d\Gamma, \quad \forall v \in K_0(\Omega_e), \end{aligned} \tag{35}$$

$$\int_{\Omega_e} \phi^*(t) q^* d\Omega - \int_{\Omega_e} \phi^*(t) p_e^*(t) d\Omega \geq \int_{\Omega_e} u_e(t) \{q^* - p_e^*(t)\} d\Omega, \quad \forall q^* \in C_t(\Omega_e), \quad (36)$$

Además, para ambas formulaciones encontrar $\{g_e^*\} \in Q_N^*$ que satisfice la condición de transmisión

$$I_{Q_N^*}(\{r_e\}) \geq I_{Q_N^*}(\{g_e^*\}) + \sum_{e=1}^E [r_e^* - g_e^*, \gamma_e u_e]_{B(\Gamma_e)}, \quad \forall \{r_e^*\} \in Q_N^*. \quad (37)$$

Aquí los conjuntos de campos locales admisibles están definidos similarmente como en (10) y (13),(14) por

$$\left. \begin{aligned} K_t(\Omega_e) &= \{v \in H^1(\Omega_e) : v(x) \in D(\phi(x, t; \cdot)), x \in \Omega_e, \\ &\quad \gamma v(x) = \hat{u}(x, t), x \in \partial\Omega_e \cap \partial\Omega_D\}, \\ K_{\hat{u}(t)}(\Omega_e) &= \{v \in H^1(\Omega_e) : \gamma v(x) = \hat{u}(x, t), x \in \partial\Omega_e \cap \partial\Omega_D\}. \end{aligned} \right\} \text{(primal)} \quad (38)$$

$$C_t(\Omega_e) = \{q^* \in L^2(\Omega_e) : q^*(x) \in \mathcal{D}(\phi^*(x, t; \cdot)), x \in \Omega_e\}. \quad \text{(dual)} \quad (39)$$

A continuación deduciremos el modelo totalmente primal, el cual se considerará posteriormente.

El modelo primal con transmisión dualizada en su forma subdiferencial es

$$-\gamma_{\Gamma_e}^T g_e^* \in \frac{\partial u_e}{\partial t} + A_e u_e - f_e + \gamma_{N_e}^T \hat{g}_e + \partial\Phi_e(u_e),$$

$$\{\gamma_e u_e\} \in \partial I_{Q_N^*}(\{g_e^*\}),$$

donde

$$\mathcal{A}_e : H^1(\Omega_e) \longrightarrow (H^1(\Omega_e))' \equiv \mathcal{L}(H^1(\Omega_e), R),$$

$$f_e \in (H^1(\Omega_e))', \quad (f_e(v) = \int_{\Omega_e} f v d\Omega),$$

$$\gamma_{N_e} \in \mathcal{L}(H^1(\Omega_e), H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_e \cap \partial\Omega_N)),$$

$$\gamma_{N_e}^T \in \mathcal{L}(H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega_e \cap \partial\Omega_N), (H^1(\Omega_e))'),$$

$$\Phi_e : H^1(\Omega_e) \longrightarrow R \cup \{+\infty\}, \quad \Phi_e(v) = \int_{\Omega_e} \phi_e(v) d\Omega,$$

$$\partial\Phi_e : H^1(\Omega_e) \longrightarrow 2^{(H^1(\Omega_e))'},$$

$$\gamma_{\Gamma_e} \in \mathcal{L}(H^1(\Omega_e), H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_e)),$$

$$\gamma_{\Gamma_e}^T \in \mathcal{L}(H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_e), (H^1(\Omega_e))'),$$

$$Q_N^* \subset B'(\Gamma) = \prod_{e=1}^{e-2} B'(\Gamma_e), \quad B'(\Gamma_e) = H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_e).$$

Invirtiendo la ecuación dual, se tiene $\{g_e^*\} \in \partial I_{Q_D}(\{\gamma_e u_e\})$,

de donde $\{\gamma_{\Gamma_e}^T g_e^*\} \in \{\gamma_{\Gamma_e}^T\} \circ \partial I_{Q_D} \circ \{\gamma_{\Gamma_e}\} (\{u_e\})$.

Esto es,

$$\{\gamma_{\Gamma_e}^T g_e^*\} \in \partial(I_{Q_D} \circ \{\gamma_{\Gamma_e}\}) (\{u_e\}).$$

Por lo tanto el modelo totalmente primal resulta ser

$$0 \in \left\{ \frac{\partial u_e}{\partial t} \right\} + \{ \mathcal{A}_e u_e \} - \{ f_e \} + \{ \gamma_{N_e}^T \hat{g}_e \} + \{ \partial \Phi_e(u_e) \}$$

$$+ \underbrace{\partial(I_{Q_D} \circ \{\gamma_{\Gamma_e}\})}_{\partial I_{P_D}}(\{u_e\}),$$

donde $P_D = \{ \{v_e\} \in \prod_{e=1}^{E-2} H^1(\Omega_e) : \gamma_{\Gamma_{12}} v_e = \gamma_{\Gamma_{12}} \}$.

En efecto $I_{P_D}(\{v_e\}) = I_{Q_D}(\{\gamma_{\Gamma_e} v_e\})$.

$$\therefore 0 \in \left\{ \frac{\partial u_e}{\partial t} \right\} + \{ \mathcal{A}_e u_e \} - \{ f_e \} + \{ \gamma_{N_e}^T \hat{g}_e \} + \{ \partial \Phi_e(u_e) \} + \partial I_{P_D}(\{u_e\}).$$

V) Discretización Espacial Mediante Elemento Finito

Cuando tratamos modelos matemáticos requerimos necesariamente de métodos numéricos para su resolución, puesto que sólo en los casos muy simples es posible hallar la solución analítica exacta de la ecuación en el modelo.

Cuando tenemos expresado un modelo matemático en forma de ecuaciones diferenciales, es necesario obtener una solución en varios puntos o inclusive en cualquier punto del dominio considerado. El método de elemento finito es una técnica general para conseguir la aproximación numérica de ecuaciones diferenciales e integrales.

A través de los años una impresionante cantidad de literatura ha aparecido cubriendo los temas de elemento finito más importantes como serían física, ingeniería, programación y matemáticas. Por ejemplo los 6 volúmenes de Graham F. Carey y J. Tinsley Oden [Cr] cubren desde los aspectos básico hasta la especialización. Una referencia hacia ingeniería es Zienkiewicz [Zi]. En lo que concierne a los aspectos matemáticos tenemos 3 libros que van desde lo básico hasta mayor profundidad, en este orden, Mitchell & Wait [MW], Strang & Fix [SF], y Ciarlet [Cl], para los cuales es necesario un conocimiento de análisis funcional.

Una obra de actualidad que presenta el estado del arte de teorías y métodos de aproximación numérica es la obra editada por Ciarlet y Lions "Handbook of Numerical Analysis", North-Holland Amsterdam Vols. I,II,III,IV.

8.-Elemento finito lagrangiano

El método de elemento finito se extendió de ser una herramienta para la ingeniería estructural, hasta un método general para resolver ecuaciones diferenciales parciales. En esta área predomina sobre sus similares: el método de diferencias finitas y el método de volúmenes finitos. Esta marcada diferencia se debe a que está mejor equipado para tratar con modelos no lineales, así como con geometrías complicadas y con diversas condiciones a la frontera.

Se caracteriza por ser comparativamente más difícil de aplicar y el conjunto de ecuaciones finales son de una estructura más elaborada. Esquemáticamente podemos decir lo siguiente :

- En el caso lineal, genera un conjunto de ecuaciones de la forma $\mathbf{S} \mathbf{U} = \mathbf{F}$.

El objetivo, una vez construidos los elementos S_{ki} y las componentes F_k , es calcular la solución \mathbf{U} . Por razones históricas \mathbf{S} fué llamada matriz de rigidez y \mathbf{F} vector de carga.

- Trabaja en dominios generales (volúmenes, superficies etc).
- Requiere una formulación integral variacional (formulación débil).
- Se aproxima mediante un número finito de funciones bases de soporte local.
- Las contribuciones calculadas para un elemento finito de referencia determinan las matrices locales de los elementos finitos reales.
- Se generan procedimientos para ensamblar la matriz \mathbf{S} y el vector \mathbf{F} .

Aspectos básicos del método de elemento finito.

El método de Galerkin.

Consideremos el problema variacional lineal: Encuentre $u \in V$ tal que

$$\forall v \in V, \quad a(u, v) = f(v),$$

donde suponemos que el espacio V y la forma bilineal a , satisfacen las condiciones del lemma de Lax-Milgram [Ci]. Entonces el método de Galerkin para aproximar la solución de este problema, consiste en definir problemas similares en subespacios de dimensión finita del espacio V . Más específicamente, para un subespacio V_h de V , asociamos el problema discreto:

Encuentre $u_h \in V_h$ tal que $\forall v_h \in V_h, a(u_h, v_h) = f(v_h)$

Supondremos que el problema variacional abstracto corresponde a uno elíptico de segundo orden con valores de frontera, planteado sobre un conjunto abierto Ω de \mathbb{R}^n , con frontera suficientemente suave Γ . Así podemos considerar el método de elemento finito, en su forma más simple, como un proceso específico de construcción de subespacios V_h , a los que llamaremos espacios de elemento finito. Esta construcción está caracterizada por tres aspectos primordiales:

1.- Una triangulación \mathcal{T}_h se establece sobre el dominio Ω , es decir, Ω se divide en un número finito de subconjuntos E , llamados elementos finitos, en los que se satisfacen las siguientes propiedades:

$$\bar{\Omega} = \cup_{E \in \mathcal{T}_h} E.$$

Cada $E \in \mathcal{T}_h$ es un conjunto cerrado y su interior $\overset{\circ}{E}$ es no vacío.

Para cada par distinto $E_l, E_m \in \mathcal{T}_h$, se tiene $\overset{\circ}{E}_l \cap \overset{\circ}{E}_m = \emptyset, l \neq m$.

2.- Las funciones base de elemento finito son tipo polinomial en cada elemento $E \in \mathcal{T}_h$. Este punto es importante puesto que es la base para los resultados de convergencia, via el análisis de error de interpolación.

3.- La elección de la base es crucial porque se utiliza el hecho de que los soportes de la función base son pequeños, dando lugar a una matriz del tipo "bandeada". Con lo anterior y con una numeración adecuada, se obtiene un cálculo sencillo de los coeficientes del sistema lineal resultante.

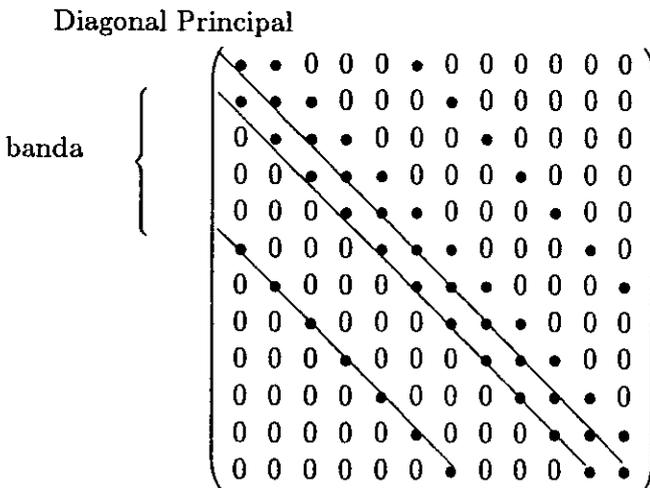


Fig. 8. Matriz de banda.

9.-Esquema de “upwind” de Tabata

Como se ha mencionado, el caso de advección dominante en su tratamiento numérico requiere ser estabilizado. Un método para ello es el de características presentado en la sección 6.

En esta sección, consideraremos otro tipo de método estabilizador llamado “upwind” y en particular el de Tabata.

Consideremos el componente variacional advectivo:

$$B = \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \text{grad } u \, v \, \partial\Omega$$

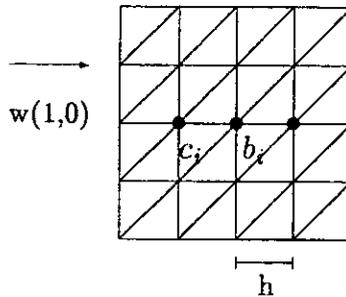


Fig. 9 El “upwind” de Tabata.

Cuya versión de elemento finito es

$$B_{ij} = \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \text{grad } \psi_j \psi_i \partial\Omega,$$

Siendo la norma del campo de velocidad \mathbf{w} no necesariamente unitaria, podemos expresarlo de la siguiente manera:

$$B_{ij} = \int_{\Omega} \|\mathbf{w}\| \frac{\psi_j}{\partial w} \psi_i \partial\Omega,$$

la derivada direccional en la dirección del flujo está definida por

$$\frac{\partial \psi_j}{\partial w} = \frac{w}{\|\mathbf{w}\|} \cdot \text{grad } \psi_j.$$

Entonces la aproximación de Tabata [Ta], usando la cuadratura de Simpson, está dada por

$$B_{ij} \cong \frac{S_i}{3} \|\mathbf{w}(b_i)\| \frac{\psi_j(b_i) - \psi_j(c_j)}{|b_i - c_j|},$$

S_i denota el soporte de la función base ψ_i

Para los valores específicos de esta matriz de advección de Tabata, véase la sección 14.

La relación de este esquema de “upwind” de Tabata con el método de características ha sido estudiada por Bermudez-Durany [BeDul] en el caso estacionario.

En esencia ésta se establece considerando el mismo esquema de cuadratura de Simpson para el primer término de la Ec. 22 y argumentando que el paso en el tiempo Δt es del orden de $|b_i - c_i| / \| \mathbf{w}(b_i) \|^2$.

10.-El método de elemento finito macrohíbrido y mixto

Se llaman métodos mixtos de elemento finito a aquellos métodos que se basan en las formulaciones primal-dual.

De una manera general, podemos definir un métodos híbrido como aquel basado en formulaciones variacionales en donde incognitas del tipo traza son definidas sobre superficies internas que descomponen al “dominio” original en subdominios.

A continuación se muestra el desarrollo del método de elemento finito macrohíbrido y mixto para el caso de dos subdominios; su generalización para más subdominios es inmediata y directa.

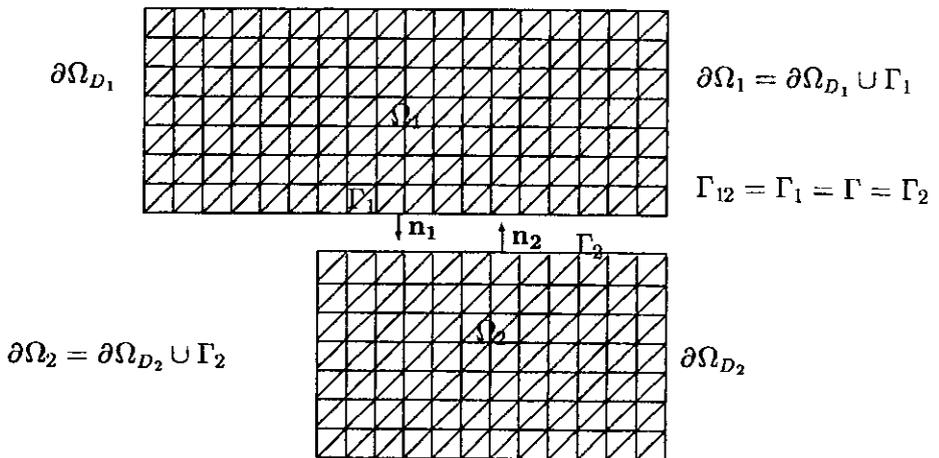


Fig. 9 Descomposición en dos subdominios $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$.

En base al planteamiento de la sección 7, los problemas locales y condiciones de transmisión para la partición de la Fig. 9 toman la forma

$$(LM_e) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u_e}{\partial t} - \epsilon \operatorname{div} \{ \mathbf{K} \operatorname{grad} u_e \} + \mathbf{w}_e \cdot \operatorname{grad} u_e = f_e - p_e^* \\ u_e \in \partial \phi_e^*(p_e^*) \\ \gamma_e u_e = \hat{u}_e \\ -\epsilon \frac{\partial u_e}{\partial n_e} = g_e^* \\ u_e(0) = u_{e0} \end{array} \right. \begin{array}{l} \text{en } \Omega_e \times (0, T), \\ \\ \text{sobre } \partial \Omega_{De}, \\ \text{sobre } \Gamma_e, \\ \text{en } \Omega_e, e=1,2. \end{array}$$

$$(LS) \left\{ \left\{ \begin{array}{l} \gamma_1 u_1 \\ \gamma_2 u_2 \end{array} \right\} \in \partial I_{Q_N}^* \left(\left\{ \begin{array}{l} g_1^* \\ g_2^* \end{array} \right\} \right) \text{ sobre } \Gamma \right\}.$$

Aquí el subespacio de flujos en equilibrio en la interfase $\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$ está definido por

$$Q_N^* = \left\{ \left\{ \begin{array}{l} b_1^* \\ b_2^* \end{array} \right\} \in H^{-1/2}(\Gamma) \times H^{-1/2}(\Gamma) : b_1^* = -b_2^* \text{ sobre } \Gamma \right\}.$$

Recuérdese que el modelo subdiferencial (LS) caracteriza las condiciones clásicas de continuidad (véase Lema 8.1):

$$\left. \begin{aligned} \gamma_1 u_1 &= \gamma_2 u_2, \\ -\epsilon \frac{\partial u_1}{\partial n_1} &= \epsilon \frac{\partial u_2}{\partial n_2}, \end{aligned} \right\} \text{ sobre } \Gamma.$$

El modelo macrohíbrido primal a aproximarse por elemento finito es el siguiente :

Encuentre u_e , con $u_e(0) = u_{0e} \in K_e(0)$ y para toda $t \in (0, T)$, $u_e(t) \in K_e(t)$ tal que

$$(GP_e) \left\{ \begin{aligned} & \int_{\Omega_e} \frac{\partial u_e(t)}{\partial t} (v_e - u_e(t)) d\Omega_e + \epsilon \int_{\Omega_e} \mathbf{K} \text{grad } u_e(t) \cdot \{ \text{grad } v_e - \text{grad } u_e(t) \} d\Omega_e \\ & + \int_{\Omega} \mathbf{w}_e(t) \cdot \text{grad } u_e(t) (v_e - u_e(t)) d\Omega + \int_{\Omega_e} \phi(t; v) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} \phi(t; u_e(t)) d\Omega_e \\ & \geq \int_{\Omega_e} (f(t)) (v_e - u_e(t)) d\Omega_e - \int_{\Gamma} g_e^*(t) (\gamma v_e - \gamma u_e) d\Gamma, \forall v_e \in K_e(t). \end{aligned} \right.$$

El modelo macrohíbrido mixto a aproximar por elemento finito es :

Encuentre u_e , con $u_e(0) = u_{e0} \in K_{\hat{u}_e}(0)$ y para toda $t \in (0, T)$, $u_e(t) \in K_{\hat{u}_e}(t)$, y $p^*(t) \in L^2(\Omega_e)$, tales que

$$(GM_e) \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega_e} \frac{\partial u_e(t)}{\partial t} (v_e - u_e(t)) d\Omega_e + \epsilon \mathbf{K} \int_{\Omega_e} \text{grad } u_e(t) \cdot \{ \text{grad } v_e - \text{grad } u_e(t) \} d\Omega_e \\ + \int_{\Omega} \mathbf{w}_e(t) \cdot \text{grad } u_e(t) (v_e - u_e(t)) d\Omega \geq \int_{\Omega_e} (f_e(t) - p_e^*(t)) (v_e - u_e(t)) d\Omega_e \\ - \int_{\Gamma} g_e^*(t) (\gamma v_e - \gamma u_e(t)) d\Gamma, \quad \forall v_e \in K_{\hat{u}_e(t)}, \\ \int_{\Omega_e} \phi_e^*(t; q_e^*) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} \phi_e^*(t; p_e^*(t)) d\Omega_e \geq \int_{\Omega_e} u_e(t) (q_e^* - p_e^*) d\Omega_e, \quad \forall q_e^* \in L^2(\Omega_e). \end{array} \right.$$

Además para ambos problemas encontrar $\{g_e^*\}_{e=1}^2 \in Q_N^* \subset H^{-1/2}(\Gamma) \times H^{-1/2}(\Gamma)$:

$$(GS) \left\{ \begin{array}{l} 0 \geq \int_{\Gamma_1} \gamma_1 u_1(t) (r_1^* - g_1^*(t)) d\Gamma_1 + \int_{\Gamma_2} \gamma_2 u_2(t) (r_2^* - g_2^*(t)) d\Gamma_2, \\ \forall \left\{ \begin{array}{l} r_1^* \\ r_2^* \end{array} \right\} \in Q_N^* . \end{array} \right.$$

Aquí los conjuntos de admisibilidad están dados por:

$$K_e(t) = \{v \in H^1(\Omega_e) : \phi(t; v(\cdot)) \in L^1(\Omega_e), \gamma_e v = \hat{u}_e(t) \text{ sobre } \partial\Omega_{De}\},$$

$$\mathbf{K}_{\hat{\mathbf{u}}_e}(t) = \{v \in H^1(\Omega_e) : \gamma_e v = \hat{u}_e(t) \text{ sobre } \partial\Omega_{De}\}.$$

Aproximaremos los espacios funcionales de dimension infinita de los modelos anteriores con subespacios de dimension finita, resultando así las aproximaciones de elemento finito conformes i.e. ,

$$V_{eh} \subset V_e = H^1(\Omega_e) \text{ Conformidad local}$$

$$V_h = \{v_h : v_h|_{\Omega_e} \in V_{eh}, e = 1, 2\} \subset V(\Omega) = H^1(\Omega) \text{ Conformidad global}$$

En general se puede tener $V_h = V_{1h} \times V_{2h} \not\subset V(\Omega)$ lo que conduciría a aproximaciones no conformes globalmente. Aquí sólo se tratará el caso conforme.

De esta manera, generaremos V_h, U_h y W_h por las siguientes funciones base de elemento finito de interpolación :

$$V_h \text{ es generado por } \{\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \dots, \mathcal{L}_{m_h}\} \subset H^1(\Omega), \quad (46)$$

$$U_h \text{ es generado por } \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{r_h}\} \subset L^2(\Omega) \subset H^{-1}(\Omega), \quad (47)$$

$$W_h \text{ es generado por } \{\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{s_h}\} \subset L^2(\Gamma) \subset H^{-1/2}(\Gamma). \quad (48)$$

Se entenderá que la interfase Γ es coincidente con una de las interfases del mallado de elemento finito, entonces, los campos discretos incógnita son expresados en términos de sus vectores coordenados de elemento finito por

$$u_{he} = \sum_{j=1}^{mhe} \alpha_j^e \mathcal{L}_j^e, \quad p_{he}^* = \sum_{j=1}^{rhe} \lambda_j^e \xi_j^e, \quad g_{he}^* = \sum_{j=1}^{she} \mu_j^e \chi_j^e.$$

Similarmente las correspondientes variaciones estarán expresadas por

$$v_{he} = \sum_{j=1}^{mhe} \beta_j^e \mathcal{L}_j^e, \quad q_{he}^* = \sum_{j=1}^{rhe} \delta_j^e \xi_j^e, \quad r_{he}^* = \sum_{j=1}^{she} \nu_j^e \chi_j^e.$$

Sustituyendo los campos espacialmente discretos por sus combinaciones lineales respecto a las funciones base de elemento finito, se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_e} \frac{\partial u_{he}}{\partial t} (v_{he} - u_{he}) d\Omega_e &= \int_{\Omega_e} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^{mhe} \alpha_i^e \mathcal{L}_i^e \left(\sum_{i=1}^{mhe} \beta_i^e \mathcal{L}_i^e - \sum_{i=1}^{mhe} \alpha_i^e \mathcal{L}_i^e \right) d\Omega_e \\
&= \int_{\Omega_e} \sum_{j=1}^{mhe} \dot{\alpha}_j^e \mathcal{L}_j^e \left(\sum_{i=1}^{mhe} \beta_i^e \mathcal{L}_i^e - \sum_{i=1}^{mhe} \alpha_i^e \mathcal{L}_i^e \right) d\Omega_e \\
&= \sum_{j=1}^{mhe} \sum_{i=1}^{mhe} \underbrace{\int_{\Omega_e} \mathcal{L}_j^e \mathcal{L}_i^e d\Omega_e}_{M_{ij}^e} \dot{\alpha}_j^e (\beta_i^e - \alpha_i^e) \\
&= \underbrace{\mathbf{M}^e}_{\mathbf{M}^e} \dot{\boldsymbol{\alpha}}_e \cdot (\boldsymbol{\beta}_e - \boldsymbol{\alpha}_e) .
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\epsilon \mathbf{K} \int_{\Omega_e} (\text{grad } u_{he}) \cdot \{ \text{grad } v_{he} - \text{grad } u_{he} \} d\Omega_e \\
&= \epsilon \mathbf{K} \int_{\Omega_e} (\text{grad } \sum_{j=1}^{mhe} \alpha_j^e \mathcal{L}_j^e) \cdot \{ \text{grad } \sum_{i=1}^{mhe} \beta_i^e \mathcal{L}_i^e - \text{grad } \sum_{i=1}^{mhe} \alpha_i^e \mathcal{L}_i^e \} d\Omega_e \\
&= \epsilon \mathbf{K} \int_{\Omega_e} \sum_{j=1}^{mhe} (\text{grad } \alpha_j^e \mathcal{L}_j^e) \cdot \sum_{i=1}^{mhe} \text{grad } \mathcal{L}_i^e \{ \beta_i^e - \alpha_i^e \} d\Omega_e \\
&= \epsilon \mathbf{K} \sum_{j=1}^{mhe} \sum_{i=1}^{mhe} \underbrace{\int_{\Omega_e} (\text{grad } \mathcal{L}_j^e) \cdot \text{grad } \mathcal{L}_i^e d\Omega_e}_{A_{ij}^e} \alpha_j^e \{ \beta_i^e - \alpha_i^e \} \\
&= \epsilon \mathbf{K} \underbrace{\mathbf{A}^e}_{\mathbf{A}^e} \boldsymbol{\alpha}_e \cdot (\boldsymbol{\beta}_e - \boldsymbol{\alpha}_e) .
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_e} \mathbf{w}_e \cdot \text{grad } u_{he} (v_{he} - u_{he}) d\Omega \\
&= \int_{\Omega_e} \mathbf{w}_e \cdot \text{grad} \sum_{j=1}^{mhe} \alpha_j^e \mathcal{L}_j^e \left(\sum_{j=1}^{mhe} \beta_j^e \mathcal{L}_j^e - \sum_{j=1}^{mhe} \alpha_j^e \mathcal{L}_j^e \right) d\Omega \\
&= \sum_{j=1}^{mhe} \int_{\Omega_e} \mathbf{w}_e \cdot \text{grad} \alpha_j^e \mathcal{L}_j^e \sum_{i=1}^{mhe} \mathcal{L}_i^e d\Omega (\beta_i^e - \alpha_i^e) \\
&= \sum_{j=1}^{mhe} \sum_{i=1}^{mhe} \underbrace{\int_{\Omega_e} \mathbf{w}_e \cdot \text{grad} \mathcal{L}_j^e \mathcal{L}_i^e d\Omega}_{B_{ij}^e} \alpha_i^e (\beta_i^e - \alpha_i^e) \\
&= \overbrace{\mathbf{B}^e} \alpha_e \cdot (\beta_e - \alpha_e) .
\end{aligned}$$

$$\Phi_{he}(\beta) = \int_{\Omega_e} \phi \left(\sum_{i=1}^{mhe} \beta_i \mathcal{L}_i^e \right) d\Omega .$$

$$\int_{\Omega_e} (f_e - p_e^*)(v_e - u_e) d\Omega_e$$

$$= \int_{\Omega_e} \left(f_e - \sum_{j=1}^{rhe} \lambda_j^e \xi_j^e \right) \left(\sum_{j=1}^{mhe} \beta_j^e \mathcal{L}_j^e - \sum_{j=1}^{mhe} \alpha_j^e \mathcal{L}_j^e \right) d\Omega_e$$

$$= \sum_{i=1}^{mhe} \underbrace{\int_{\Omega_e} f_e \mathcal{L}_i^e d\Omega_e}_{\alpha_i^e} (\beta_i^e - \alpha_i^e) - \sum_{j=1}^{rhe} \sum_{i=1}^{mhe} \underbrace{\int_{\Omega_e} \mathcal{L}_i^e \xi_j^e d\Omega_e}_{\lambda_j^e} \lambda_j^e (\beta_i^e - \alpha_i^e)$$

$$= \underbrace{f_i^e \quad \quad \quad C_{ji}^e}_{f_e \cdot (\beta_e - \alpha_e) \quad - \quad \mathbf{C}^{eT} \lambda^e \cdot (\beta_e - \alpha_e) .}$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma} g_{he}^* (\gamma_e v_{he} - \gamma_e u_{he}) d\Gamma \\ &= \int_{\Gamma} \sum_{j=1}^{she} \mu_j^e \chi_j^e (\gamma_e \sum_{j=1}^{mhe} \beta_j^e \mathcal{L}_j^e - \gamma_e \sum_{j=1}^{mhe} \alpha_j^e \mathcal{L}_j^e) d\Gamma \\ &= \sum_{j=1}^{she} \sum_{i=1}^{mhe} \underbrace{\int_{\Gamma} \gamma_e \mathcal{L}_i^e \chi_j^e d\Gamma}_{D_{ji}^e} \mu_j^e (\beta_i^e - \alpha_i^e) \\ &= \underbrace{\mathbf{D}^{eT} \mu^e \cdot (\beta_e - \alpha_e) .} \end{aligned}$$

Usando $\tilde{\Phi}_{h_e}^*(\delta) = \int_{\Omega_e} \phi^* (\sum_{i=1}^{mhe} \delta_i \xi_i) d\Omega$, tenemos que en la segunda desigualdad

del modelo (GM_e):

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_e} \phi^*(q_{he}^*) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} \phi^*(p_{he}^*) d\Omega_e \geq \int_{\Omega_e} u_{he} (q_{he}^* - p_{he}^*) d\Omega_e \\ & \approx \int_{\Omega_e} \phi^* (\sum_{j=1}^{rhe} \delta_j^e \xi_j^e) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} \phi^* (\sum_{j=1}^{rhe} \lambda_j^e \xi_j^e) d\Omega_e \geq \int_{\Omega_e} \sum_{i=1}^{mhe} \alpha_i^e \mathcal{L}_i^e (\sum_{j=1}^{rhe} \delta_j^e \xi_j^e - \sum_{j=1}^{rhe} \lambda_j^e \xi_j^e) d\Omega_e \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \approx \underbrace{\int_{\Omega_e} \phi^* \left(\sum_{j=1}^{r_{he}} \delta_j^e \xi_j^e \right) d\Omega_e}_{C_{ji}^e} - \underbrace{\int_{\Omega_e} \phi^* \left(\sum_{j=1}^{r_{he}} \lambda_j^e \xi_j^e \right) d\Omega_e}_{C^e} \geq \sum_{i=1}^{m_{he}} \sum_{j=1}^{r_{he}} \underbrace{\int_{\Omega_e} \mathcal{L}_i^e \xi_j^e d\Omega_e}_{C_{ji}^e} \alpha_i^e (\delta_j^e - \lambda_j^e) \\ & \approx \bar{\Phi}_{he}^*(\delta^e) - \bar{\Phi}_{he}^*(\lambda^e) \geq C^e \alpha^e \cdot (\delta^e - \lambda^e). \end{aligned}$$

Finalmente para el modelo (GS):

$$\begin{aligned} 0 & \geq \int_{\Gamma_1} \gamma_1 u_{h1} (r_{h1}^* - g_{h1}^*) d\Gamma_1 + \int_{\Gamma_2} \gamma_2 u_{h2} (r_{h2}^* - g_{h2}^*) d\Gamma_2 \\ & \approx \int_{\Gamma_1} \gamma_1 \sum_{j=1}^{m_{he}} \alpha_j^1 \mathcal{L}_j^1 \left(\sum_{j=1}^{s_{he}} \nu_j^1 \chi_j^1 - \sum_{j=1}^{s_{he}} \mu_j^1 \chi_j^1 \right) d\Gamma_1 + \int_{\Gamma_2} \gamma_2 \sum_{j=1}^{m_{he}} \alpha_j^2 \mathcal{L}_j^2 \left(\sum_{j=1}^{s_{he}} \nu_j^2 \chi_j^2 - \sum_{j=1}^{s_{he}} \mu_j^2 \chi_j^2 \right) d\Gamma_2 \\ & = \underbrace{\sum_{j=1}^{m_{he}} \sum_{i=1}^{s_{he}} \int_{\Gamma_1} \gamma_1 \mathcal{L}_j^1 \chi_i^1 d\Gamma_1}_{D_{ij}^1} \alpha_j^1 (\nu_i^1 - \mu_i^1) + \underbrace{\sum_{j=1}^{m_{he}} \sum_{i=1}^{s_{he}} \int_{\Gamma_2} \gamma_2 \mathcal{L}_j^2 \chi_i^2 d\Gamma_2}_{D_{ij}^2} \alpha_j^2 (\nu_i^2 - \mu_i^2) \\ & = \mathbf{D}_1 \alpha^1 \cdot (\nu^1 - \mu^1) + \mathbf{D}_2 \alpha^2 \cdot (\nu^2 - \mu^2) \end{aligned}$$

De acuerdo a la identificación de las matrices, vectores y funciones discretas exhibidas en el modelo semidiscreto tenemos, para $i, j = 1, \dots, m_{he}$, $r = 1, \dots, r_{he}$, $s = 1, \dots, s_{he}$:

$$M_{ij}^e = \int_{\Omega_e} \mathcal{L}_j^e \cdot \mathcal{L}_i^e d\Omega_e, \quad \text{Matriz de masa.} \quad (48)$$

$$A_{ij}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{K} \text{ grad } \mathcal{L}_j^e \cdot \text{grad } \mathcal{L}_i^e d\Omega_e, \quad \text{Matriz de difusión.} \quad (49)$$

$$B_{ij}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{w} \cdot \text{grad } \mathcal{L}_j^e \mathcal{L}_i^e \partial\Omega_e, \quad \text{Matriz de advección.} \quad (50)$$

$$f_i^e = \int_{\Omega_e} f \mathcal{L}_i^e d\Omega_e, \quad \text{Vector fuente} \quad (51)$$

$$\bar{\Phi}_{he}^*(\delta^*) = \int_{\Omega_e} \phi_h^* \left(\sum_{i=1}^{r_h} \delta_i^* \xi_i^e \right) d\Omega_e, \quad \text{Superpotencial discreto} \quad (52)$$

conjugado de control

$$C_{ri}^e = \int_{\Omega_e} \mathcal{L}_i^e \xi_r^e d\Omega_e, \quad \text{Matriz C de conectividad} \quad (53)$$

(temperatura-control)

$$D_{si}^e = \int_{\Gamma_e} \gamma_e \mathcal{L}_i^e \chi_s^e d\Gamma, \quad \text{Matriz D de conectividad} \quad (54)$$

(temperatura-flujo interfásico)

11.-Modelos semidiscretos macrohíbridos

Usando la notación de la sección anterior, el modelo macrohíbrido primal de elemento finito toma la forma :

$$\begin{aligned}
 &\text{Encuentre } \alpha^e(t) \in K_{m_{he}}(t) \text{ con } \alpha^e(0) = \alpha_0^e \in K_{m_{he}}(0) \text{ tal que:} \\
 &\{M^e \dot{\alpha}^e(t) + \epsilon A^e \alpha^e(t) + B^e(t) \alpha^e(t)\} \cdot \{\beta^e - \alpha^e(t)\} + \Phi_{he}(t; \beta^e) \\
 &- \Phi_{he}(t; \alpha^e(t)) \geq \{f^e(t) - D^{eT} \mu^e(t)\} \cdot \{\beta^e - \alpha^e(t)\}, \\
 &\forall \beta^e \in K_{m_{he}}(t), \quad e = 1, 2;
 \end{aligned} \tag{55}$$

mientras que el modelo macrohíbrido mixto es :

$$\begin{aligned}
 &\text{Encuentre } \alpha^e(t) \in K_{\hat{u}_{he}}(t) \text{ con } \alpha^e(0) = \alpha_0^e \in K_{u_{he}}(0) \text{ tal que:} \\
 &\{M^e \dot{\alpha}^e(t) + \epsilon A^e \alpha^e(t) + B^e(t) \alpha^e(t)\} \cdot \{\beta^e - \alpha^e(t)\} \geq \{f^e(t) - C^{eT} \lambda^e(t) \\
 &- D^{eT} \mu^e(t)\} \cdot \{\beta^e - \alpha^e(t)\}, \forall \beta^e \in K_{u_{he}}, \quad e = 1, 2.
 \end{aligned} \tag{56}$$

y $\lambda^e(t) \in \mathcal{D}(\tilde{\Phi}_{h_e}^*(t)) \subset \mathcal{R}^{r_{he}}$ tal que:

$$\begin{aligned}
 &\tilde{\Phi}_{h_e}^*(t; \delta^e) \geq \tilde{\Phi}_{h_e}^*(t; \lambda^e) + C^e \alpha^e(t) \cdot \{\delta^e - \lambda^e(t)\}, \\
 &\forall \delta^e \in \mathcal{D}(\Phi_{h_e}^*(t)), \quad e = 1, 2.
 \end{aligned} \tag{57}$$

Además, para ambos problemas, se tiene la condición de sincronización, donde debemos encontrar $(\mu_1(t), \mu_2(t)) \in Q_{Nh}^*$ tal que:

$$\left. \begin{aligned} 0 &\geq \mathbf{D}_1 \alpha_1(t) \cdot (\nu_1 - \mu_1(t)) + \mathbf{D}_2 \alpha_2(t) \cdot (\nu_2 - \mu_2(t)), \forall (\nu_1, \nu_2) \in Q_{Nh}^*, \\ Q_{Nh}^* &= \{(\nu_1, \nu_2) \in R^{S_h} \times R^{S_h} : \nu_1 = -\nu_2\}. \end{aligned} \right\} (58)$$

A continuación se presenta la expresión subdiferencial del modelo primal:

$$\begin{aligned} &-\mathbf{M}^e \dot{\alpha}^e(t) - \epsilon \mathbf{A}^e \alpha^e(t) - \mathbf{B}^e(t) \alpha^e(t) + \mathbf{f}^e(t) - \mathbf{D}^{eT} \mu^e(t) \\ &\in \partial \Phi_{h_e}(t; \alpha^e(t)) + \partial \mathbf{I}_{K_{h_e}(t)}(\alpha^e(t)), \quad e = 1, 2. \end{aligned} \quad (59_{MP})$$

Así mismo, el modelo macrohíbrido mixto subdiferencial resulta ser :

$$\begin{aligned} &-\mathbf{M}^e \dot{\alpha}^e(t) - \epsilon \mathbf{A}^e \alpha^e(t) - \mathbf{B}^e(t) \alpha^e(t) + \mathbf{f}^e(t) - \mathbf{C}^{eT} \lambda^e(t) - \mathbf{D}^{eT} \mu^e(t) \\ &\in \partial \mathbf{I}_{K_{h_e}(t)}(\alpha^e(t)), \end{aligned} \quad (59_{MM})$$

$$\mathbf{C}^e \alpha^e(t) \in \Phi_{h_e}^*(t; \lambda^e(t)), \quad e = 1, 2.$$

Igualmente para la ec. (58) $\{\mathbf{D}^e \alpha^e\}_{e=1}^2$ es un elemento del subdiferencial $\partial \mathbf{I}_{Q_{Nh}^*}(\mu)$ esto es,

$$\mathbf{D} \alpha = \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{Bmatrix} \in \partial \mathbf{I}_{Q_{Nh}^*}(\mu). \quad (60)$$

Debe hacerse notar que, en general, los funcionales de los modelos primal y mixto no son conjugados el uno del otro, pues el problema primal que se asocia al mixto no corresponde, en todos los casos, al problema primal original.

VI) Esquemas Numéricos

En las siguientes tres secciones se realizan los pasos finales que nos conducirán a los algoritmos numéricos.

Una vez que tenemos el modelo de elemento finito, es necesario garantizar una convergencia uniforme de las soluciones, lo que se consigue, en particular, introduciendo la técnica de “upwind” desarrollada por Tabata [Ta]. Referencias para esquemas numéricos tenemos [Gr],[He],[Ca]

La discretización en el tiempo, la obtenemos con el esquema semi-implícito de Euler, caracterizándolo $ALGO_M$, un algoritmo de proximidad. Éste es uno de los pasos más importantes durante el desarrollo de los esquemas numéricos.

El algoritmo anterior resulta ser muy valioso, puesto que se le puede sacar ventaja, en el sentido de utilizarlo para tratar no sólo problemas de evolución en el tiempo, sino problemas estacionarios donde la matriz M actúa como un preconditionador del proceso iterativo correspondiente.

La metodología utilizada aquí, consiste en caracterizar desigualdades variacionales en términos de operadores resolventes, los cuales se caracterizan por operadores de proximidad. A su vez, los operadores de proximidad relativos a funcionales indicatrices son operadores de proyección para nuestro problema de control con descomposición de dominios. El esquema desarrollado $ALGO_M$ resulta ser un proceso de tres proyecciones sucesivas.

La metodología de resolventes ha sido planteada en [A6] presentándose aplicaciones al método de descomposición de dominios en [A4]. Un trabajo teórico a este respecto -por aparecer- es [A5].

12.-Esquema semiimplícito de Euler: algoritmo $ALGO_M$

Para obtener la versión primal del problema macrohíbrido reescribiremos la ecuación (55) ó (59), dualizando la ecuación dual de sincronización (58) ó (60), donde aplicaremos el esquema semimplícito de Euler, con τ_n el paso en el tiempo.

Así, tenemos las ecuaciones subdiferenciales

$$\begin{aligned}
 -\mathbf{D}^{eT} \mu^e(t) \in \mathbf{M}^e \dot{\alpha}^e(t) + \epsilon \mathbf{A}^e \alpha^e(t) + \mathbf{B}^e(t) \alpha^e(t) - \mathbf{f}^e(t) \\
 + \partial \Phi_{h_e}(t; \alpha^e(t)) + \partial \mathbf{I}_{K_{\hat{u}_{h_e}(t)}}(\alpha^e(t)), \quad e = 1, 2;
 \end{aligned} \tag{59}$$

$$\left\{ \begin{array}{c} D_1 \alpha_1(t) \\ D_2 \alpha_2(t) \end{array} \right\} \in \partial \mathbf{I}_{Q_{N_h}^*} \left(\left\{ \begin{array}{c} \mu_1(t) \\ \mu_2(t) \end{array} \right\} \right). \tag{60}$$

Dualizando esta última, se tiene su versión primal

$$\left\{ \begin{array}{c} \mu_1(t) \\ \mu_2(t) \end{array} \right\} \in \partial \mathbf{I}_{(Q_{N_h}^*)^*} \left(\left\{ \begin{array}{c} D_1 \alpha_1(t) \\ D_2 \alpha_2(t) \end{array} \right\} \right),$$

de donde

$$\left\{ \begin{array}{c} D_1^T \mu_1(t) \\ D_2^T \mu_2(t) \end{array} \right\} = \mathbf{D}^T \mu(t) \in \mathbf{D}^T \partial \mathbf{I}_{(Q_{N_h}^*)^*} \circ \mathbf{D} \alpha(t) = \partial \left(\mathbf{I}_{(Q_{N_h}^*)^*} \circ \mathbf{D} \right) \alpha(t).$$

El conjugado de la función indicatriz resulta ser la función indicatriz del convexo.

Lema 2. $(\mathbf{I}_{Q_{Nh}})^* = \mathbf{I}_{Q_{Dh}}$; $Q_{Dh} = \{(\mu_1, \mu_2) \in R^{S_h} \times R^{S_h} : \mu_1 = \mu_2\}$.

Demostración: Usando el Lema 1 de la Sección 8, se tiene $\mathbf{I}_{Q_{Nh}}^* = (\mathbf{I}_{Q_{Dh}})^*$, por convexidad; si volvemos a conjugar esta expresión, $(\mathbf{I}_{Q_{Nh}}^*)^* = ((\mathbf{I}_{Q_{Dh}})^*)^*$ se obtiene $(\mathbf{I}_{Q_{Nh}})^* = \mathbf{I}_{Q_{Dh}}$. \square

Consecuentemente tenemos la versión primal desglosada del modelo macrohíbrido en los siguientes términos:

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{c} 0_1 \\ 0_2 \end{array} \right\} \in \left\{ \begin{array}{cc} \mathbf{M}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_2 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} \dot{\alpha}_1(t) \\ \dot{\alpha}_2(t) \end{array} \right\} + \epsilon \left\{ \begin{array}{cc} \mathbf{A}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{A}_2 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} \alpha_1(t) \\ \alpha_2(t) \end{array} \right\} \\ & + \left\{ \begin{array}{cc} \mathbf{B}_1(t) & 0 \\ 0 & \mathbf{B}_2(t) \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} \alpha_1(t) \\ \alpha_2(t) \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{f}_1(t) \\ \mathbf{f}_2(t) \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \partial \Phi_{h_1}(t; \alpha_1(t)) \\ \partial \Phi_{h_2}(t; \alpha_2(t)) \end{array} \right\} \\ & + \left\{ \begin{array}{c} \partial \mathbf{I}_{K_{a_{h1}(t)}}(\alpha_1(t)) \\ \partial \mathbf{I}_{K_{a_{h2}(t)}}(\alpha_2(t)) \end{array} \right\} + \partial (\mathbf{I}_{Q_{Dh}} \circ D) \left\{ \begin{array}{c} \alpha_1(t) \\ \alpha_2(t) \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

En su forma compacta se expresa como :

$$\begin{aligned} 0 \in & \mathbf{M}\dot{\alpha}(t) + \epsilon \mathbf{A}\alpha(t) + \mathbf{B}(t)\alpha(t) - \mathbf{f}(t) + \partial \Phi_h(t; \alpha(t)) + \partial \mathbf{I}_{\hat{a}_h}(t)(\alpha(t)) \\ & + \partial (\mathbf{I}_{Q_{Dh}} \circ D)(\alpha(t)). \end{aligned}$$

Aplicando el esquema semiimplícito de Euler se obtiene

$$0 \in \mathbf{M} \frac{\alpha(t_{n+1}) - \alpha(t_n)}{\tau_n} + \underbrace{\epsilon \mathbf{A} \alpha(t_n) + \mathbf{B}(t_n) \alpha(t_n) - \mathbf{f}(t_n)}_{\mathcal{A}(t_n; \alpha(t_n))} \\ + \underbrace{\partial \Phi_h(t_{n+1}; \alpha(t_{n+1})) + \partial \mathbf{I}_{\tilde{u}_h(t_{n+1})}(\alpha(t_{n+1})) + \partial (\mathbf{I}_{Q_{Dh}} \circ D)(\alpha(t_{n+1}))}_{\partial(G(t_{n+1}) \circ \Lambda)(\alpha(t_{n+1}))},$$

tomando la forma compacta:

$$0 \in \mathbf{M} \frac{\alpha(t_{n+1}) - \alpha(t_n)}{\tau_n} + \mathcal{A}(t_n; \alpha(t_n)) + \partial(G(t_{n+1}) \circ \Lambda)(\alpha(t_{n+1})). \quad (61)$$

Aquí el paso en el tiempo τ_n , puede ser variable.

13.-Interpretación del esquema semiimplícito de Euler como el algoritmo ALG0_M

Partiendo de la ec. (61), se tiene la interpretación

$$\mathbf{M}\alpha(t_n) - \tau_n \mathcal{A}(t_n; \alpha(t_n)) \in \left(\mathbf{M} + \tau_n \partial(G(t_{n+1}) \circ \Lambda) \right) \alpha(t_{n+1}). \quad (61')$$

Entonces, usando el operador resolvente del subdiferencial $\partial(G(t_{n+1}) \circ \Lambda)$,

$$\mathbf{J}_{\mathbf{M}, \partial(G(t_{n+1}) \circ \Lambda)}^{\tau_n} \equiv \left(\mathbf{M} + \tau_n \partial(G(t_{n+1}) \circ \Lambda) \right)^{-1},$$

se concluye la caracterización

$$\alpha(t_{n+1}) = \mathbf{J}_{\mathbf{M}, \partial(G(t_{n+1}) \circ \Lambda)}^{\tau_n} \left(\mathbf{M}\alpha(t_n) - \tau_n \mathcal{A}(t_n; \alpha(t_n)) \right).$$

A continuación haremos uso del concepto de mapeo de proximidad aplicando la siguiente definición, para un subdiferencial monótono general ∂H ,

$$\mathbf{J}_{\mathbf{M}, \partial H}^{\tau_n}(\mathbf{M}\beta) = \text{Prox}_{\mathbf{M}, \tau_n H}(\beta) \equiv \arg \left(\inf_{\delta} \left\{ \frac{1}{2} \|\delta - \beta\|_M^2 + \tau_n H(\delta) \right\} \right)$$

Así, tenemos la expresión

$$\begin{aligned}\alpha(t_{n+1}) &= \text{Prox}_{M, \tau_n G(t_{n+1}) \circ \Lambda} \left(\alpha(t_n) - \tau_n \mathbf{M}^{-1} \mathcal{A}(t_n; \alpha(t_n)) \right) \\ &\equiv \arg \left(\inf_{\delta} \left(\frac{1}{2} \|\delta - \alpha(t_n) + \tau_n \mathbf{M}^{-1} \mathcal{A}(t_n; \alpha(t_n))\|_M^2 + \tau_n (G(t_{n+1}) \circ \Lambda)(\delta) \right) \right).\end{aligned}$$

Puesto que,

$$\begin{aligned}G(t_{n+1}) \circ \Lambda(\delta) &= \mathbf{I}_{Q_{Dh}}(\mathbf{D}\delta) + \underbrace{\Phi_h(t_{n+1}; \delta)}_{\mathbf{I}_{\mathcal{L}_h(t_{n+1})}(\delta)} + \mathbf{I}_{K_{\theta_h}(t_{n+1})}(\delta)\end{aligned}$$

esto es, el funcional es la suma de tres funcionales indicatrices, el operador de proximidad resulta ser una proyección. En efecto,

$$\begin{aligned}\text{Prox}_{M, \tau_n (G(t_{n+1}) \circ \Lambda)}(\beta) &= \arg \left(\inf_{\delta} \left(\frac{1}{2} \|\delta - \beta\|_M^2 + \mathbf{I}_{Q_{Dh}}(\mathbf{D}\delta) + \mathbf{I}_{\mathcal{L}_h(t_{n+1})}(\delta) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathbf{I}_{K_{\theta_h}(t_{n+1})}(\delta) \right) \right) \\ &= \arg \left(\inf_{\delta \in P_{Dh}(t_{n+1}) \cap K_{\theta_h}(t_{n+1})} \left(\frac{1}{2} \|\delta - \beta\|_M^2 \right) \right) \\ &= \text{Proy}_{M, P_{Dh}} \circ \text{Proy}_{M, \mathcal{L}_h(t_{n+1})} \circ \text{Proy}_{M, K_{\theta_h}(t_{n+1})}(\beta)\end{aligned}$$

Por lo tanto el esquema semiimplícito de Euler toma la forma

ALGO_M

$$\alpha(t_{n+1}) = \text{Proy}_{\mathbf{M}, \mathcal{K}_{t_{n+1}}}(Z_n)$$

donde $Z_n = \alpha(t_n) - \tau_n \mathbf{M}^{-1} \{ \epsilon \mathbf{A} + \mathbf{B}(t_n) \} \alpha(t_n) + \tau_n \mathbf{M}^{-1} \mathbf{f}(t_n)$,

$\text{Proy}_{\mathbf{M}, \mathcal{K}_{t_{n+1}}} = \text{Proy}_{\mathbf{M}, \mathbf{P}_{Dh}} \circ \text{Proy}_{\mathbf{M}, \mathcal{L}_h(t_{n+1})} \circ \text{Proy}_{\mathbf{M}, \mathcal{K}_{a_h}(t_{n+1})}(\beta)$.

El subespacio \mathbf{P}_{Dh} es la versión discreta del subespacio \mathbf{P}_D de la sección 7.

Como se ha mencionado, este esquema se puede interpretar como un algoritmo iterativo preconditionado (por la matriz de masa \mathbf{M}) que resuelve el problema estacionario asociado al de evolución (59), (60), (véase (61')) ;

$$\mathbf{M}\alpha \in \tau_n \mathcal{A}(\alpha) + \mathbf{M}\alpha + \tau_n \partial(G \circ \Lambda)(\alpha), \tau_n > 0. \quad (62)$$

14.-Un ejemplo modelo

En esta sección se da una aplicación al desarrollo teórico y metodológico del trabajo, considerando un dominio bidimensional específico Ω , junto con un flujo y una fuente dados.

Sea $\Omega = (1, 3) \times (0, 2) \cup (0, 1] \times (1, 2) \subset \mathbb{R}^2$ la región espacial de flujo, véase Fig. 11, donde se tiene el transporte de calor o masa, de acuerdo al modelo físico (1):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \text{grad } u - \epsilon \text{div}\{\mathbf{K} \text{grad } u\} = f \quad \text{en } \Omega \times (0, T).$$

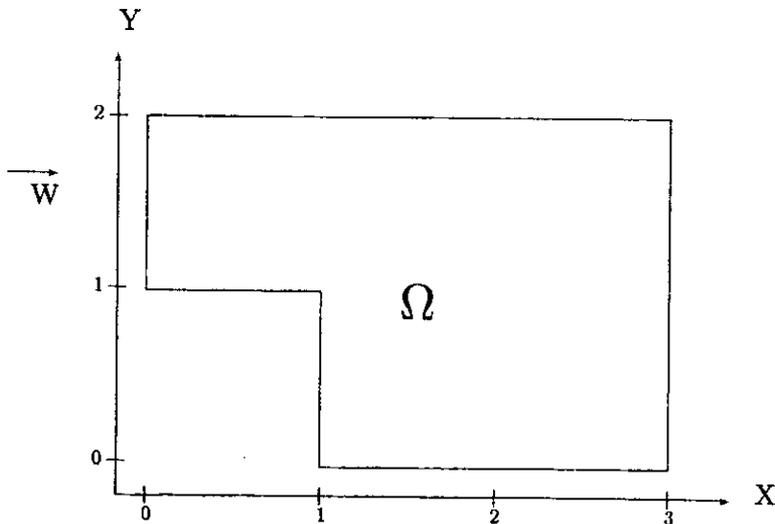


Fig. 11 Dominio espacial.

La velocidad del flujo es $w=(1,0)$, la función fuente $f=1$, la condición de frontera Dirichlet $\bar{u} = 0$, la cota inferior $f_i=-1$ y la superior $f_s=2$. Además tendremos como parámetro de malla la base de los triángulos de elemento finito, $h = \frac{1}{6}$, como parámetro de difusión varios ϵ , con sus correspondientes números de Peclet $Pe_h = \frac{h}{\epsilon}$.

Como descomposición del dominio se considerarán dos casos. El primero corresponde a la descomposición paralela al eje X, donde la numeración de los nodos se maneja de manera libre, como se muestra en la Fig. 12,

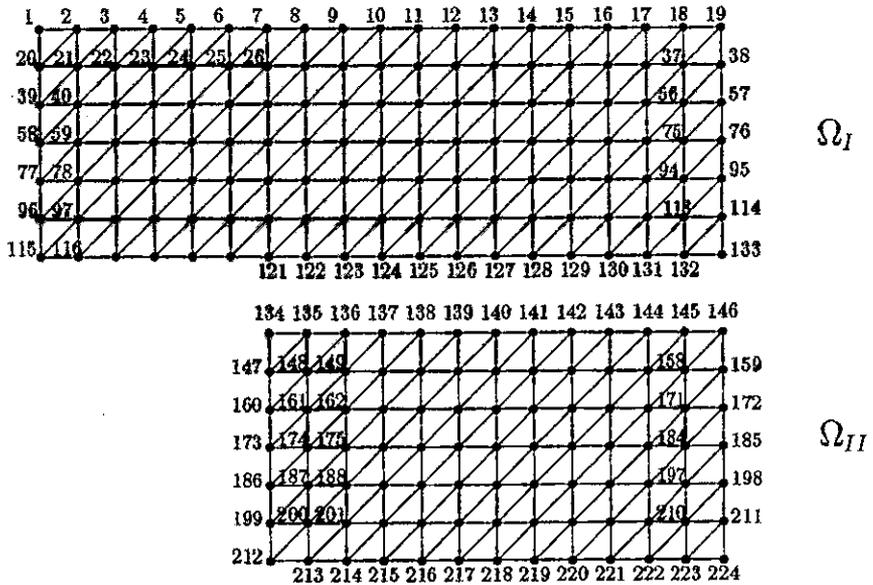


Fig. 12 Descomposición del dominio a lo largo del eje X y su numeración.

El segundo caso corresponde a la separación del dominio paralela al eje Y, teniendo como numeración la respectiva a la Fig. 13.

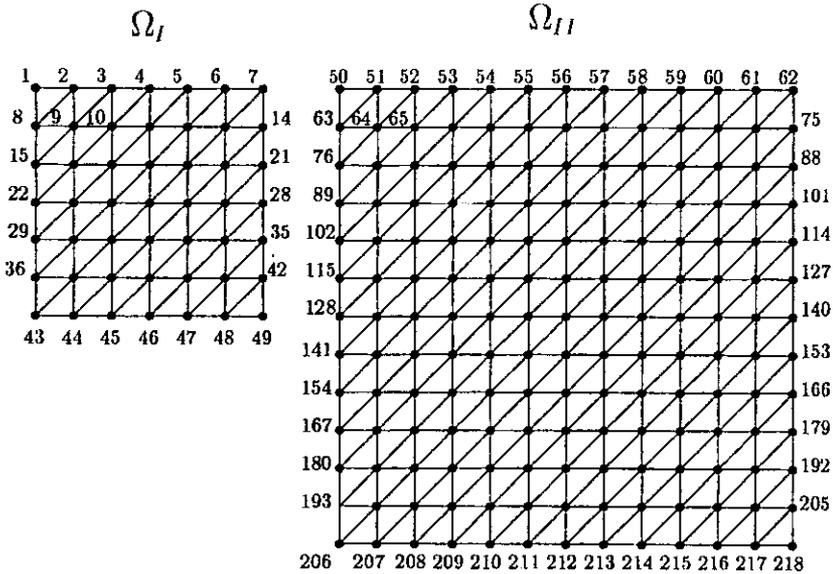


Fig. 13 Descomposición del dominio a lo largo del eje Y y su numeración.

Para obtener el valor numérico de las matrices A, B, M , necesarias en el esquema, se realiza el cálculo, usando su respectiva definición, Ecs. 48, 49 y 50, en matrices locales y tomando en cuenta cada uno de los distintos tipos de nodos (véase Fig. 14).

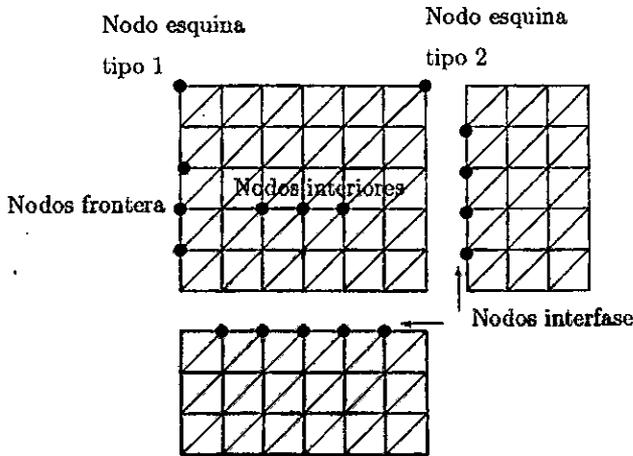


Fig. 14. Distintos tipos de nodos.

Los valores de las matrices son los siguientes :

Matriz de masa diagonal $M_{ii} = h^2$, para nodos interiores

Matriz de difusión simétrica

$A_{ii} = 4$, nodos interiores en la diagonal principal,

$A_{ij} = -1$, nodos interiores en las diagonales contiguas a la principal,

$A_{ij} = -1$, nodos interiores en la diagonal lejana.

Matriz de advección triangular inferior.

$$B_{ii} = +h, \text{ nodos interiores,}$$

$$B_{i,i-1} = -h, \text{ nodos interiores.}$$

Cuando se trata de un nodo que no es interno, se tiene el siguiente cuadro, aplicable a las tres matrices.

Nodo tipo	Valor
Esquina tipo 1	$\frac{1}{6}$ de un nodo interno
Esquina tipo 2	$\frac{1}{3}$ de un nodo interno
Frontera o interfase	$\frac{1}{2}$ de un nodo interno

En la siguiente sección se verá el tipo y el tamaño de las matrices así como las operaciones realizadas entre ellas.

VII) Modelos Computacionales

En la medida que deseamos resolver, en este caso con elemento finito, cada vez una mayor diversidad de problemas (electromagnetismo, flujo de flúidos, elasticidad), o bién el mismo problema, pero con variantes del mismo método, es necesario tener un programa de cómputo muy completo que debería de contar con rutinas específicas. Por ejemplo un programa que pueda trabajar con diferentes elementos finitos, que una misma malla pueda servir para resolver un problema de elasticidad o uno de térmica, y que pueda ejecutar diferentes discretizaciones en el tiempo, etc.

Uno de los ejemplos más representativos y mejor estructurado de lo anteriormente mencionado es el programa Modulef, cuyo código ha sido desarrollado por el INRIA ("Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique") de Francia, que permite resolver una gran variedad de problemas clásicos, como son problemas de conducción de calor, sólidos elásticos y elastoplásticos, flúidos incompresibles y compresibles, viscosos y no viscosos, de filtración en medios porosos, de magnetohidrodinámica, propagación de ondas etc. Este consiste de un conjunto de subrutinas en Fortran para resolver problemas clásicos, pudiendose utilizar también para desarrollar nuevos métodos aprovechando su código.

Uno de los objetivos de este trabajo es en el sentido de generar el código necesario para la implementación numérica del algoritmo.

En los capítulos anteriores se presentó la teoría, toca ahora la realización de un programa en una computadora.

La versión que se presenta aquí, en lenguaje Fortran, puede utilizarse como punto de partida para otros algoritmos similares. Se describen las partes esenciales del código y el diagrama de flujo de los datos, se continúa con varios experimentos numéricos y se reportan los resultados, conclusiones y perspectivas para futuros trabajos al respecto.

Las referencias necesarias para las siguientes secciones son: para el tratamiento del problema estacionario de advección-difusión [A1], para la aplicación de mecanismos de control, ver [A2], y un enfoque donde se presentan esquemas de descomposición de dominio aplicados en problemas de evolución en el tiempo, lo encontramos en [A3]; en lo que respecta a Modulef tenemos [Pe].

15.-Descripción del programa para computadora

Ambas descomposiciones de dominio comparten el mismo diagrama de programación (véase Fig. 15).

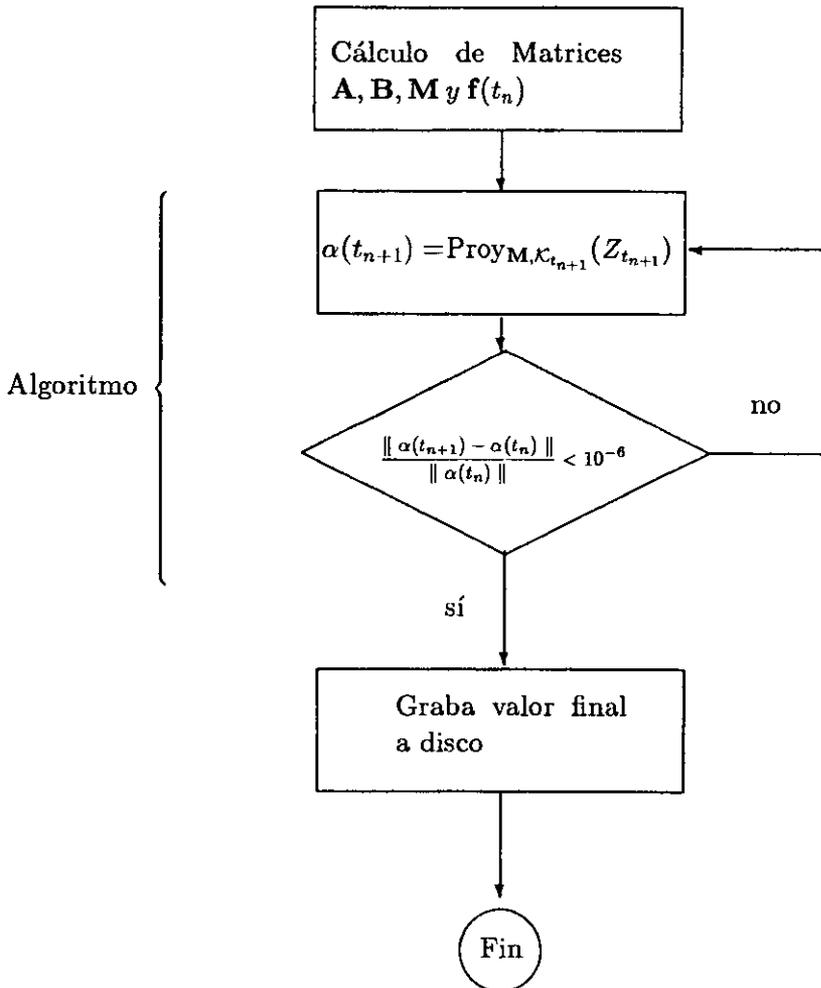


Fig. 15 Diagrama de programación.

Dado que ambas separaciones de dominio tienen programas muy semejantes, se detalla aquí para el caso de la separación del dominio paralela al eje X.

Tenemos una geometría con 360 elementos finitos triangulares, lo que implica 224 nodos, y matrices cuadradas de $224 \times 224 = 50,176$ elementos. Debido a que son de tipo bandeada sólo almacenamos en archivos la diagonal distinta de cero que se encuentra a lo largo de dichas bandas.

La matriz **A** consiste de una diagonal principal, que representa la interacción $A_{i,i}$ del nodo consigo mismo, dos diagonales contiguas a la diagonal principal (debido a que **A** es simétrica), que representa la interacción con el nodo vecino de al lado y dos diagonales una lejana y otra cercana a la diagonal principal que son las interacciones con el nodo de abajo. Todo lo anterior da 863 elementos almacenados en disco.

La matriz **B** consiste de una diagonal principal, que representa la interacción $B_{i,i}$ del nodo consigo mismo, una diagonal contigua (abajo de la diagonal principal debido al "upwind"), que representa la interacción $B_{i,i-1}$ con el nodo vecino de la izquierda, lo que da 447 elementos almacenados en disco.

La matriz M^{-1} consiste de 224 elementos almacenados en disco, lo mismo que el vector fuente **f**. Usamos la máxima tolerancia entre estados del sistema permitida, a nivel PC, del orden de 10^{-6} , y se elige como condición inicial $\alpha(t) = 0$.

Recordando que el algoritmo es

ALGO_M

$$\alpha(t_{n+1}) = \text{Proy}_{M, \mathcal{K}_{t_{n+1}}}(Z_n)$$

donde $Z_n = \alpha(t_n) - \tau_n M^{-1} \{ \epsilon A + B(t_n) \} \alpha(t_n) + \tau_n M^{-1} f(t_n)$,

$$\text{Proy}_{M, \mathcal{K}_{t_{n+1}}} = \text{Proy}_{M, P_{Dh}} \circ \text{Proy}_{M, L_h(t_{n+1})} \circ \text{Proy}_{M, K_{a_h}(t_{n+1})}(\beta).$$

Calculamos el valor de $\alpha(t)$ en el tiempo $\tau, 2\tau \dots n\tau$ empezando desde el valor asumido al tiempo $t = 0$.

Un aspecto a destacar es que la proyección consiste de tres partes, que se aplican en el siguiente orden: La primera es proyectar respecto a los valores de la frontera, dando valor cero a los nodos que pertenezcan a toda ella.

La segunda es proyectar respecto al control, condicionando que ningún elemento tenga valor mayor a la cota superior ni menor a la cota inferior.

La tercera consiste en proyectar respecto a la interfase, asignando el valor promedio de cada uno de los nodos adyacentes que pertenezcan a ella.

El programa graba en disco los siguientes archivos: Los valores de las matrices \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{M}^{-1} , el vector \mathbf{f} , el archivo de la suma de matrices que será usado en la multiplicación con $\alpha(t_n)$, los archivos de valores finales de la temperatura y del control.

Es precisamente de estos dos últimos archivos con los que se construyen las gráficas que acompañan este trabajo.

16.-Experimentos numéricos y resultados

Experimentos Numéricos para el modelo totalmente primal

Para ambas descomposiciones se procede a determinar el tiempo de arribo a la estacionariedad del sistema, denotándolo T_e , en el orden de 10^{-6} .

Una vez determinado lo anterior se vuelve operar el programa de cómputo, deteniendo el proceso para obtener los datos en los siguientes intervalos específicos $\frac{1}{4}T_e, \frac{1}{2}T_e, \frac{3}{4}T_e$

Recordemos que el número de Peclet se define como $Pe_h = \frac{h}{\epsilon}$, donde $h = \frac{1}{6}$ es el parámetro de malla y ϵ el parámetro que pondera la difusión.

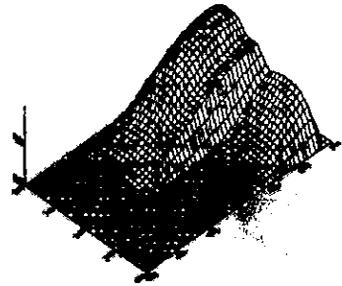
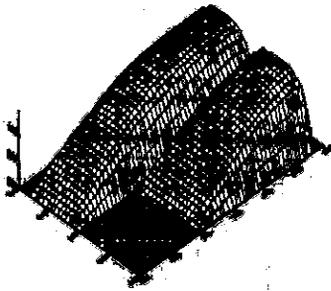
Se presentan a continuación las gráficas de la solución numérica de la temperatura u_h , así como el respectivo valor p_h^* del control.

Descomposici3n paralela al eje X, con cota superior $C_s = 2$

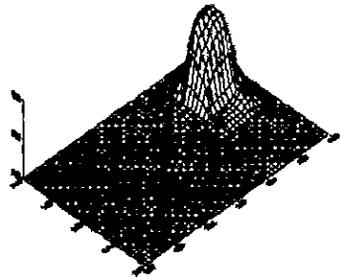
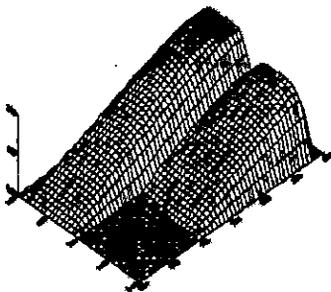
$\epsilon = 0.01$ $P_s = 16.66$

Soluci3n discreta u_h

Control distribuido p_h



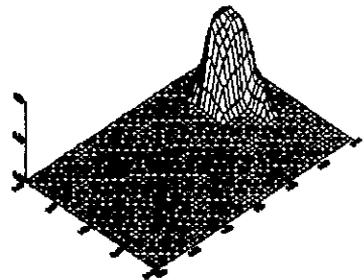
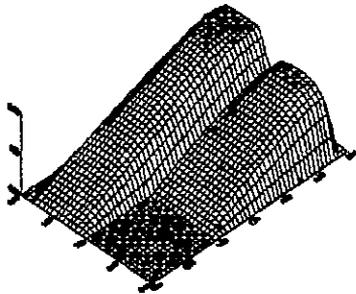
1
t = T_0
4



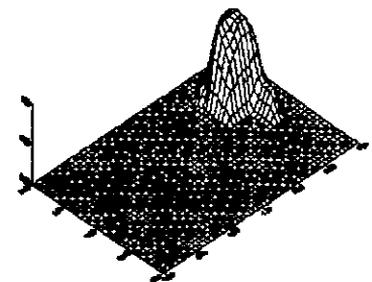
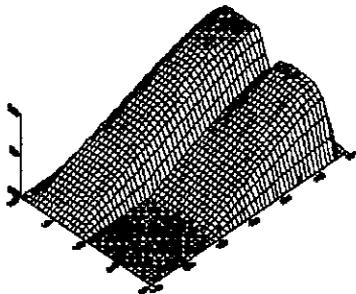
1
t = T_0
2

Solución discreta u_h

Control distribuido p_h



$$t = \frac{3}{4} T_e$$

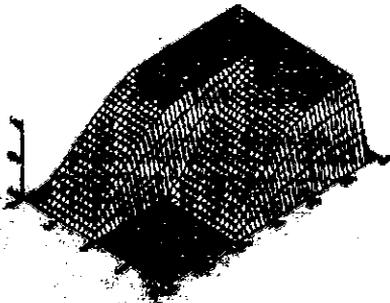


$$t = T_e$$

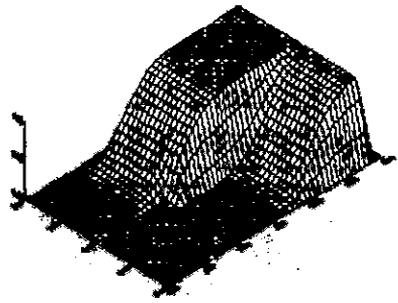
Descomposición paralela al eje X , con cota superior $C_0 = 2$

$$\epsilon = 0.0001 \quad P_e = 1666.66$$

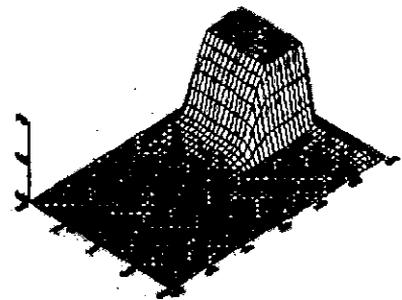
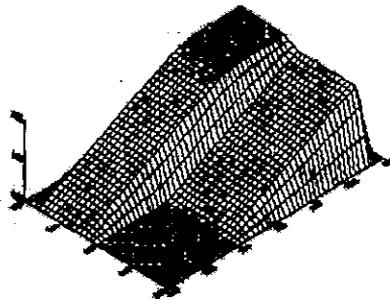
Solución discreta u_h



Control distribuido p_h



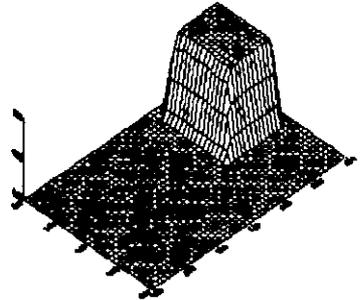
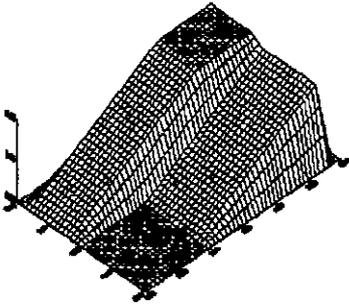
$$f = \frac{1}{4} T_e$$



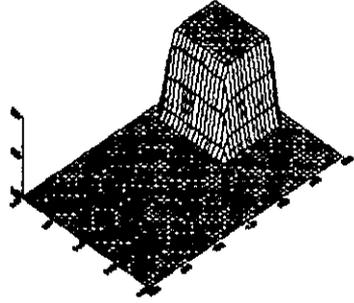
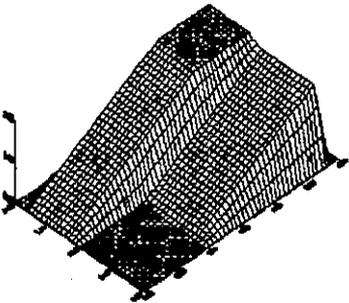
$$f = \frac{1}{2} T_e$$

Solución discreta u_h

Control distribuido p_h



$t = \frac{3}{4} T_e$

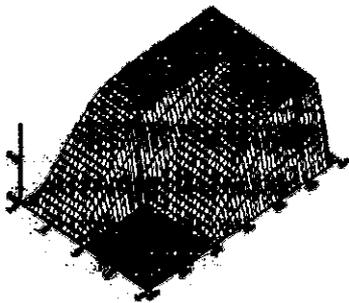


$t = T_e$

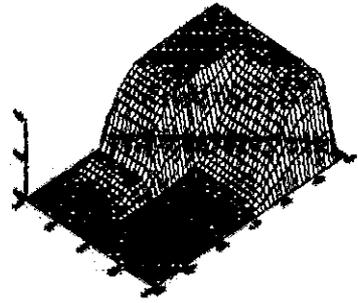
Descomposición a lo largo de Y , con cota superior $C_0 = 2$

$$\epsilon = 0.0001 \quad P_0 = 1666.666$$

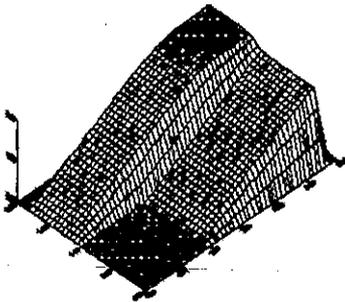
Solución discreta u_h



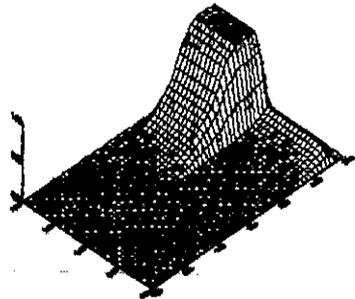
Control distribuido p_h

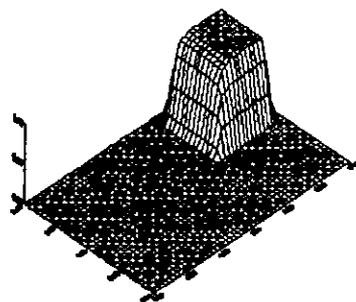
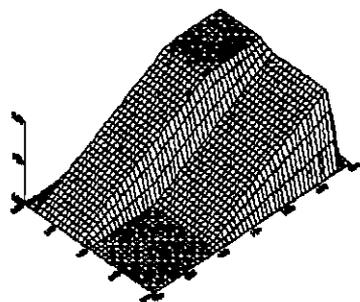


1
1e-7e
4

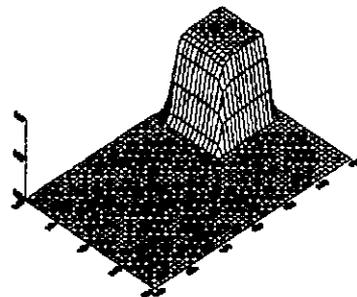
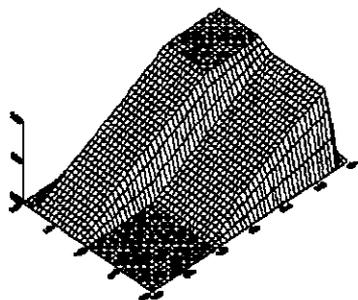


3
1e-7e
4





3
 $t = T_0$
4



$t = T_0$

Conclusiones

Enfocaré las conclusiones desde varios puntos de vista.

Punto de vista físico: Con el algoritmo estamos emulando dos subsistemas físicos ligados por una interfase y que evolucionan en el tiempo hacia un estado estacionario.

El tratamiento de las restricciones en el dominio, via mecanismos de control, se comprueba que es adecuado. El metodo macrohíbrido para descomposición de dominios sin traslape y la modelación variacional de las condiciones de transmisibilidad resultan exitosas, para la advección dominante.

Un camino sugerido para posteriores estudios es el uso de la descomposición de dominios, para desarrollar su implementación en algoritmos en paralelos y tal vez, hacer uso de una supercomputadora en paralelo.

Punto de vista matemático: Hemos empleado el concepto fundamental de la modelación matemática: el subdiferencial, la abstracción multivaluada del concepto clásico diferencial univaluado.

Se ha trabajado en un problema donde se han visto las relaciones que gobiernan el campo tanto al interior como sobre la frontera, en ambos casos con restricciones, usando el hecho que esas relaciones son modelables de una manera natural y provechosa en términos de subdiferenciales.

En lo que respecta a los métodos numéricos, el esquema de Tabata de "upwind", como se sabe, y se observó también en éste trabajo, es efectivo en la aproximación de la estabilización con advección dominante.

Punto de vista metodológico: El propósito del trabajo fué el de involucrar en la concepción del modelo, la descomposición de dominios, lo cual es ventajoso en los casos de problemas de gran escala, de subsistemas interáctantes, y de regiones con geometrias complicadas. El enfoque subdiferencial, como se ha visto a lo largo de este trabajo, es muy adecuado, porque permite sistematizar las formulaciones variacionales. No solo se aplicó en condiciones de frontera, sino que se logró su uso en mecanismos de transmisibilidad (entre los dos subdominios).

Referencias

- [A1] Alduncin, G. (1989). *Subdifferential and Variational Formulations of Boundary Value Problems*, Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg. 72, (1989),173-186.
- [A2] Alduncin, G. *Primal and Mixed Upwind Finite Element Approximations of Control Advection-Difusion Problems*, Comput. Mech., 11 (1993), 93-106.
- [A3] G. Alduncin, *Duality and Variational Principles of Potential Boundary Value Problems*, Comp. Meth. Appl. Mech. Engrn. 64 (1987), 469-485.
- [A4] Alduncin, G., *Numerical Resolvent Methods por Constrained Problems in Mechanics*, Approximation Theory and its Applications 12-4 (1996) p. 1-25.
- [A5] Alduncin, G., *Numerical Resolvent Methods for Macro-Hybrid Mixed Variational Inequalities* , Numerical Functional Analysis and Optimization (Sometido, Diciembre, 1997)
- [A6] Alduncin, G., *On Gabay's Algorithms for Mixed Variational Inequalities*, Applied Mathematics and Optimization 35 (1997) p. 21-44.
- [Ag] A. Agouzald, J.-M. Thomas, *Une Méthode d'Éléments Finis Hybrides en Décomposition de Domaines*, M² AN Modélisation Math. Anal. Numér.,

Math. Modelling Numer. Anal. Vol. 29 (1995), 749-764.

[BeDu1] Bermudez, A, Durany, J., *La méthode des caractéristiques pour les problèmes de convection-diffusion stationnaires*, Modélisation Mathématique et Analyse Numérique, Paris, Vol 21 (1987) 7-26.

[BeDu2] Bermudez, A, Durany, J., *Application of characteristics method with variable time-step to steady-state convection-diffusion problems*, Numerical Approximations of Partial Differential Equations, E. Ortiz (ed), North-Holland, Mathematical Studies 133 (1987).

[Br] F. Brezzi, L.D Marini, *A Three Field Domain Decomposition Method*, in Domain Decomposition Methods in Science and Engineering, A. Quarteroni, J. Periaux, Y.A. Kusnetsov and O.B. Widlund, eds., American Mathematical Society, Providence, 1994, 27-34.

[Ca] Claes Johnson, *Numerical solutions of partial differential equations by the finite element method*, (Cambridge University Press 1987).

[Cl] P.G. Ciarlet, *Handbook of Numerical Analysis*, in , Vol 1,2,3,4, P.G. Ciarlet and J.L. Lions, eds., North-Holland, Amsterdam, 1991, 17-351.

[Cr] Graham F. Carey, J. Tinsley Oden, *Finite Elements*. The University of Texas at Austin. Vols I ... VI (Prentice-Hall 1986).

[Gl] R. Glowinski, P. Le Tallec, *Augmented Lagrangian and Operator-Splitting Methods in Nonlinear Mechanics*, SIAM, Philadelphia, 1989.

[Gr] David F. Griffiths, *The mathematical basis of finite elements methods*,

(Clarendon Press - Oxford 1984).

[Gu] Gurtin, M.E., An introduction to Continuum Mechanics, (Academic Press 1981) .

[Le] P. Le Tallec, *Domain Decomposition methods in computational mechanics*, Computational Mechanics Advances 1 121-220 (North-Holland, Amsterdam 1995).

[MW] Mitchell, A. R, Wait, R, The Finite Element Method in Partial Differential Equations, (Chichester, Wiley 1984).

[Pe] The Club Modulef A. Perronnet., Laboratoire d'Analyse Numérique Université Pierre et Marie Curie, IRIA, Paris 1997.

[Pi] O. Pironneau, *On the transport-diffusion algorithm and its applications to the Navier-Stokes equations*, Numer. Math. 38, (1982) 309-323.

[Sm] Peter Smith, Convexity Methods in Variational Calculus, (John Wiley & Sons 1985).

[SF] Strang, G., G.J. Fix, An Analysis of the Finite Element Method, (Prentice-Hall, Englewood Cliffs 1973).

[Ta] Tabata M., *A finite element approximation corresponding to the upwind differencing*, Memoirs Num. Math. 1, (1997) 47-63.

[Va] A. van der Burgh, J. Simonis, Topics in Engineering Mathematics (Kluwer Academic Publisher 1992).

[Zi] O. C. Zienkiewicz y R. L. Taylor, El método de los elementos finitos (MacGraw-Hill Barcelona 1993).

Algoritmo ALGOM

```

PROGRAM SPLITX
COMMON M,SC,LB,UB,EPS,TER,W1,W2,M1,M2,M21,M12,M3,M31,M13,H,PEC,BW,
INI,INT,NB,MT,NS1,NS2,NS3,NS4,IFSUP,INI,I,I2,TAO
C REAL IA(151)
C REAL CS(151)

INTEGER M,SC,LB,UB,IFSUP,INI,I,I2
REAL EPS,TER,TAO
C WRITE(*,*) 'PLEASE ENTER DATA.'
C WRITE(*,*) 'PARAM. (6) DIMENSION M = '
C READ(*,*) M
C WRITE(*,*) 'FUENTE CONSTANTE (1) SC = '
C READ(*,*) SC
C WRITE(*,*) 'LIMITE INFER.(<=0) LB = '
C READ(*,*) LB
C WRITE(*,*) 'LIMITE SUPER.(>=0) UB = '
C READ(*,*) UB
C WRITE(*,*) 'EPSILON EPS = '
C READ(*,*) EPS
C WRITE(*,*) 'ERROR DE TOLERANCIA TER = '
C READ(*,*) TER
C WRITE(*,*) 'PASO EN TIEMPO TAO TAO = '
C READ(*,*) TAO

M=6
SC=1
LB=0
UB=2
EPS=.01
TER=.0000001
TAO=.1
W1 = 1
W2 = 0
M1 = M + 1
M2 = 2 * M
M21 = M2 + 1
M12 = M2 - 1
M3 = 3 * M
M31 = M3 + 1
M13 = M3 - 1
H = 1.00 / M
PEC = H / EPS
BW = 6 * M - 1
NI = M31 * M1 + M21 * M1
NT = M31 * M1 + M21 * M
NB = NT - NI
MT = 5 * 2 * M * M
NS1 = M13 * (M - 2)
NS2 = NS1 + M1
NS3 = NS2 + M12
NS4 = NI - M12
M21 = M2 + 1
M31 = M3 + 1
C 133
IFSUP = M31 * M1
C 91
DNI = M21 * M1
W = SQRT(W1 **2 + W2 ** 2)
4 FORMAT(A1)
8 FORMAT(I3)
C 13 FORMAT(F17.9,I3)
CALL S900
CALL S1000
CALL S3000
CALL S4000
CALL S5000(R0)
STOP * SPLITX.FOR *
END

SUBROUTINE S900
COMMON M,SC,LB,UB,EPS,TER,W1,W2,M1,M2,M21,M12,M3,M31,M13,H,PEC,BW,
INI,INT,NB,MT,NS1,NS2,NS3,NS4,IFSUP,INI,I,I2,TAO
INTEGER M,SC,LB,UB,IFSUP,INI,I,I2
REAL EPS,TER,TAO
REAL IA(244)

INTEGER ICOL(4)
CHARACTER AN
OPEN(1,FILE='C:\FORTRAN\M1.DAT',STATUS='OLD')

```

Algoritmo ALGOM

```

OPEN(5,FILE='CAPORTRAMMF.DAT,STATUS='OLD')
4 FORMAT(A1)
5 FORMAT(I)
8 FORMAT(F9.5,I3)
13 FORMAT(F9.5,I4)
WRITE(*,*)'FORMANDO LA MATRIZ INVERSA'
IA(1) = (H * H / 6)                                NODO 1
DO 6 I = 2, M31 - 1                                  NODO 2.184
    IA(I) = (H * H / 2)
6 CONTINUE
IA(19) = (H * H / 3)                                NODO 19
C NUMERA LA FRONTERA NODOS 20,39,58,77,96
C NUMERA LA FRONTERA NODOS 20,39,58,77,96
C NUMERA LA FRONTERA NODOS 38,57,76,95,114
DO 15 J = 1, M - 1
    I1 = J * M31 + 2
    I2 = M31 * (J + 1) - 1
    IA(I1 - 1) = H * H / 2
    IA(I2 + 1) = H * H / 2
    DO 14 I = I1, I2
        IA(I) = H * H
14 CONTINUE
15 CONTINUE
C NODO 115 y NODO 133
IA(6 * M31 + 1) = H * H / 3
IA(IFSUP) = H * H / 6
C NODO FRONTERA E INTERFASE 116 AL 132
DO 18 I = 6 * M31 + 2, IFSUP - 1
    IA(I) = H * H / 2
18 CONTINUE
C NODO 134
IA(134) = (H * H / 6)
DO 22 I = 135, 145
    IA(I) = (H * H / 2)
22 CONTINUE
C NODO 146
IA(146) = (H * H / 3)
C NODO INTERIORES 148 AL 210
DO 26 J = 1, M - 1
    I1 = (IFSUP) + J * M21 + 2
    I2 = (IFSUP) + M21 * (J + 1) - 1
C NUMERA LA FRONTERA NODO 147,160,173,186,199
C NUMERA LA FRONTERA NODO 159,173,185,198,211
IA(I1 - 1) = H * H / 2
IA(I2 + 1) = H * H / 2
DO 24 I = I1, I2
    IA(I) = H * H
24 CONTINUE
26 CONTINUE
C NODO 212 y NODO 224
IA(IFSUP + 6 * M21 + 1) = H * H / 3
IA(IFSUP + 6 * M21 + M21) = H * H / 6
C NODO FRONTERAS 213 AL 223
DO 28 I = IFSUP + 6 * M21 + 2, IFSUP + 7 * M21 - 1
    IA(I) = H * H / 2
28 CONTINUE
DO 30 I = 1, NI
C GRABA EL INVERSO DE MI
C GRABA EL VECTOR FUENTE
WRITE(1,13) 1.00/IA(I), I
WRITE(5,13) IA(I), I
C WRITE(*,*) 1.00/IA(I), I
IA(I) = 0
C PRINT #1, 1.00/ A(I), I
C PRINT #5, A(I), I
30 CONTINUE
31 CLOSE(1)
32 CLOSE(5)
RETURN
END

SUBROUTINE S1000
COMMON M,SC,I,B,UB,EPS,TER,W1,W2,M1,M2,M21,M12,M3,M31,M13,H,PEC,BW,
INI,NT,ND,MT,NS1,NS2,NS3,NS4,IFSUP,INR,I1,I2,TAO
INTEGER M,SC,IB,UB,IFSUP,INI,I1,I2
REAL EPS,TER,TAO
REAL IA(244)
INTEGER ICOL(4)

```

Algoritmo ALGOM

```

CHARACTER AN
OPEN(3,FILE='CAFORTRAMMA.DAT',STATUS='OLD')
4 FORMAT(A1)
5 FORMAT(I)
8 FORMAT(4,4)
13 FORMAT(F9.5,4)
WRITE(*,*) 'FORMANDO LA MATRIZ DE DIFUSION'
C  S U P E R I O R
C  Diagonal principal, dominio superior, XXXX Elementos
C  Representa la Interaccion consigo misma
C  Debe Totalizar 224 Elementos
DO 100 I = 1, NI
    WRITE(3,13) 4.0, I
C  WRITE(*,*) I
100 CONTINUE
C  Diagonal contigua
C  Representa la Interaccion con el elemento vecino
C  DOMINIO SUPERIOR
C  2-18,21-37,40-56...116-132
1070 DO 1080 J = 1, M + 1
    I1 = 2 + (J - 1) * M31
    I2 = I1 + M31 - 3
    DO 1075 I = I1, I2
        IA(I) = -1
1075 CONTINUE
1080 CONTINUE
NS3 = 135
C  DOMINIO INFERIOR NS3-135
C  135-145,148-158,161-171...213-223
DO 1084 J = 1, M + 1
    I1 = NS3 + (J - 1) * M21
    I2 = I1 + (M21 - 3)
    DO 1082 I = I1, I2
        IA(I) = -1
1082 CONTINUE
1084 CONTINUE
C  Deben Totalizar 223 Elementos
DO 1086 I = 1, NI - 1
    WRITE(3,13) IA(I), I
1086 CONTINUE
DO 1140 I = 1, NI
    IA(I) = 0
1140 CONTINUE
DO 1145 I = 1, NI
    IA(I) = 0
1145 CONTINUE
C  Diagonal cercana, dominio inferior
C  Representa la Interaccion con el elemento vecino de abajo
NS2 = 134
NS4 = 210
DO 145 I = 134, 211
    IA(I) = -1
145 CONTINUE
C  Del 134->133 son 0, Distintos 134-211, Totaliza 211
DO 1160 I = 1, NI - 13
    WRITE(3,13) IA(I), I
1160 CONTINUE
DO 1165 I = 1, NI
    IA(I) = 0
1165 CONTINUE
C  Diagonal lejana
C  Representa la Interaccion con el elemento vecino de abajo
DO 1170 I = 1, 114
    IA(I) = -1
1170 CONTINUE
C  Del 134->224 son 0, (114+91=Totaliza 205)
DO 1180 I = 1, NI - 19
    WRITE(3,13) IA(I), I
1180 CONTINUE
DO 1300 I = 1, NI
    IA(I) = 0
1300 CONTINUE
1310 CLOSE(3)
RETURN
END

SUBROUTINE S3000
COMMON M,SC,LB,UB,EPS,TER,W1,W2,M1,M2,M21,M12,M3,M31,M13,H,PEC,BW,

```

Algoritmo ALGOM

```

INI,NT,NR,MT,NS1,NS2,NS3,NS4,IFSUP,INI1,I2,TAO
INTEGER M,SC,LB,UB,IFSUP,INI1,I2
REAL EPS,TER,TAO
REAL IA(244)
CHARACTER AN
OPEN(1,FILE='C:\FORTRAN\MB.DAT',STATUS='OLD')
4 FORMAT(A1)
5 FORMAT(I)
8 FORMAT(I4,I4)
13 FORMAT(I9.5,I4)
3000 WRITE(*,*) FORMANDO LA MATRIZ DE ADVECCION
C Se Asignan valores de H al interior y de I/2 de los Nodos Newmann
C Es la Diagonal Principal de B Interaccion Bii
C NODOS FRONTERA 1 al 19, M31= 3*M + 1=19
DO 3082 I = 1, M31
IA(I) = H/2
3082 CONTINUE
DO 3086 J = 1, M - 1
H = J * M31 + 2
I2 = M31 * (J + 1) - 1
C LA FRONTERA NODOS 20,39,58,77,96
IA(I1 - 1) = H/2
C LA FRONTERA NODOS 38,57,76,95,114
IA(I2 + 1) = H/2
C 21-37,...-97-113
DO 3084 I = H, I2
IA(I) = H
3084 CONTINUE
3086 CONTINUE
C PEDAZO DE FRONTERA+INTERFASE
DO 3088 I = 115, 146
IA(I) = H/2
3088 CONTINUE
C RETOMO DE 148-210
DO 3096 J = 1, M - 1
H = (IFSUP) + J * M21 + 2
I2 = H + M21 - 3
C LA FRONTERA NODOS 147,160,173,186,199
IA(I1 - 1) = H/2
C LA FRONTERA NODOS 159,172,185,198,211
IA(I2 + 1) = H/2
C 148-158,161-171,200-210
DO 3094 I = H, I2
IA(I) = H
3094 CONTINUE
3096 CONTINUE
C BEM 304
DO 3098 I = 1, NI
WRITE(1,15) IA(I), I
3098 CONTINUE
DO 3099 I = 1, NI
IA(I) = 0
3099 CONTINUE
C Diagonal Contigua
C A continuacion se contabiliza la Interaccion Bii-1 se decir
C con los vecinos de la izquierda exclusivamente.
C NODOS FRONTERA 1 al 19
DO 3100 I = 1, M31
IA(I) = -H/2
3100 CONTINUE
C DOMINIO SUPERIOR, M31= 3*M + 1=19
DO 3110 J = 1, M + 1
C 2-18,21-37,40-56,...116-132
H = 2 + (J - 1) * M31
I2 = H + M31 - 3
C LA FRONTERA NODOS 20,39,58,77,96
IA(I1 - 1) = -H/2
C LA FRONTERA NODOS 38,57,76,95,114
IA(I2 + 1) = -H/2
DO 3108 I = H, I2
IA(I) = -H
3108 CONTINUE
3110 CONTINUE
C PEDAZO DE FRONTERA+INTERFASE
DO 3120 I = 115, 146
IA(I) = -H/2
3120 CONTINUE
NS3 = 148
C DOMINIO INFERIOR NS3=148

```

```

DO 3124 J = 1, M
C 148-158,161-171,213-223
  I1 = NS3 + (J - 1) * M21
  I2 = I1 + (M21 - 3)
C 1A FRONTERA NODOS 147,160,173,186,199
  IA(I1 - 1) = -H / 2
C 1A FRONTERA NODOS 159,172,185,198,211
  IA(I2 + 1) = -H / 2
  DO 3121 I = I1, I2
    IA(I) = -H
3121 CONTINUE
3124 CONTINUE
C Doben Totalizar 223 Elementos
DO 3130 I = 1, NI - 1
  WRITE(1,13) IA(I), I
C 1A FRONTERA NODOS 147,160,173,186,199
  WRITE(*,*) IA(I), I
3130 CONTINUE
DO 3300 I = 1, NI
  IA(I) = 0
3300 CONTINUE
3310 CLOSE(1)
RETURN
END

SUBROUTINE S4006
COMMON M,SC,LC,UB,EPS,TER,W1,W2,M1,M2,M21,M12,M3,M31,M13,H,PEC,BW,
INI,NI,NB,MT,NS1,NS2,NS3,NS4,IFSUP,INIL,I1,I2,TAO
INTEGER M,SC,LC,UB,IFSUP,INI,I1,I2,KA,KB,KMI
REAL EPS,TER,TAO,MIVARI,A1,B1
REAL IA(244)

CHARACTER AN
4 FORMAT(A1)
5 FORMAT(/)
8 FORMAT(I4,I4)
10 FORMAT(F9.5)
13 FORMAT(F9.5,I4)
4000 WRITE(*,*)'FORMANDO ALMACENAJE'
OPEN(1,FILE='C:\FORTRAN\FST1.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(2,FILE='C:\FORTRAN\FST2.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(3,FILE='C:\FORTRAN\FST3.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(4,FILE='C:\FORTRAN\FST4.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(5,FILE='C:\FORTRAN\FST5.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(6,FILE='C:\FORTRAN\FST6.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(7,FILE='C:\FORTRAN\FST7.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(8,FILE='C:\FORTRAN\MA.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(9,FILE='C:\FORTRAN\MB.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(10,FILE='C:\FORTRAN\MMI.DAT',STATUS='OLD')
WRITE(*,*)'TRABAJANDO FAVOR DE ESPERAR ...'
C Lee la Diagonal Principal de M, A y B
DO 4060 I = 1, NI
  READ(10,13) MIVARI, KMI
  READ(8,13) A1, KA
  READ(9,13) B1, KB
  IF (KA .EQ. KB) THEN
    S1 = EPS * A1 + B1
    WRITE(*,*)'OK ALMACENAJE DIAG PRINCIPAL'
  ELSE
    WRITE(*,*) A1,KA
    WRITE(*,*) B1,KB
    WRITE(*,*)'NO COINCIDEN ALMACENAJE DIAG PRINCIPAL'
    PAUSE
  END IF
  WRITE(4,10) S1
4060 CONTINUE
CLOSE(10)
OPEN(10,FILE='C:\FORTRAN\MMI.DAT',STATUS='OLD')
C Lee la Diagonal contigua de la Izda de A + Izda B, Aqui si existe B (S3)
C Lee la Diagonal contigua de la Derecha de A, Aqui NO EXISTE B (S5)
C NOTA. Se pondran las dos diagonales izda y derecha en el mismo ciclo
DO 4080 I = 1, NI - 1
  READ(10,13) MIVARI, KMI
  READ(8,13) A1, KA
  READ(9,13) B1, KB
  IF (KA .EQ. KB) THEN
    S1 = EPS * A1 + B1
    S2 = EPS * A1

```

Algoritmo ALGOM

```

WRITE(*,*) 'OK ALMACENAJE CONTIGUA'
ELSE
WRITE(*,*) 'NO COINCIDEN CONTIGUAS'
PAUSE
END IF
C NO CAMBIAR ESTE ORDEN
WRITE(3,10) S1
WRITE(5,10) S2
4080 CONTINUE
CLOSE(10)
OPEN(10,FILE='CAPORTRANMMI.DAT',STATUS='OLD')
C Lee la Diagonal cercana de A
C 211
DO 4090 I = 1, NI - M21
READ(10,13) MIVARI, KMI
READ(8,13) A1, KA
IF (KMI.EQ. KA) THEN
S1 = EPS * A1
WRITE(*,*) 'OK DIAG CERCANA'
ELSE
WRITE(*,*) 'NO COINCIDEN CERCANA'
PAUSE
END IF
WRITE(2,10) S1
WRITE(6,10) S1
4090 CONTINUE
CLOSE(10)
OPEN(10,FILE='CAPORTRANMMLI.DAT',STATUS='OLD')
C Lee la Diagonal lejana de A
C NI - M31 I - 114 y 134 NI no total 204
DO 4094 I = 1, 205
READ(10,13) MIVARI, KMI
READ(8,13) A1, KA
IF (KMI.EQ. KA) THEN
S1 = EPS * A1
WRITE(*,*) 'OK DIAG LEJANA'
ELSE
WRITE(*,*) 'NO COINCIDEN LEJANA'
PAUSE
END IF
WRITE(1,10) S1
WRITE(7,10) S1
4094 CONTINUE
4100 CLOSE(1)
4102 CLOSE(2)
4104 CLOSE(3)
4106 CLOSE(4)
4108 CLOSE(5)
4110 CLOSE(6)
4115 CLOSE(7)
4120 CLOSE(8)
4125 CLOSE(9)
4130 CLOSE(10)
RETURN
END

SUBROUTINE S5000
COMMON M,SC,LB,UB,EPS,TER,W1,W2,M1,M2,M21,M12,M3,M31,M13,H,PEC,BW,
IN1,NT,NB,MT,NS1,NS2,NS3,NS4,IFSUP,IN11,I2,TAO
INTEGER M,SC,LB,UB,IFSUP,IN11,I2,KA,KB,KMI,IC,I,J,KFV
REAL EPS,TER,TAO,MIVARI,A1,S1
REAL IAA(244)
REAL IAA(244)
REAL AII(244)
CHARACTER AN
4 FORMAT(A1)
5 FORMAT(W)
8 FORMAT(I4,I4)
10 FORMAT(F9.5)
13 FORMAT(F9.5,I4)
5000 WRITE(*,*) 'TRABAJANDO ALGOM'
OPEN(1,FILE='CAPORTRANFST1.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(2,FILE='CAPORTRANFST2.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(3,FILE='CAPORTRANFST3.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(4,FILE='CAPORTRANFST4.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(5,FILE='CAPORTRANFST5.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(6,FILE='CAPORTRANFST6.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(7,FILE='CAPORTRANFST7.DAT',STATUS='OLD')

```

Algoritmo ALGOM

```

OPEN(8,FILE='C:\FORTRAN\MA.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(9,FILE='C:\FORTRAN\MB.DAT',STATUS='OLD')

DO 5040 I = 1, 224
  READ(4,10) S4(I)
5040 CONTINUE
DO 5050 I = 1, 223
  READ(3,10) S3(I)
  READ(5,10) S5(I)
5050 CONTINUE
DO 5060 I = 1, 211
  READ(2,10) S2(I)
  READ(6,10) S6(I)
5060 CONTINUE
DO 5070 I = 1, 205
  READ(1,10) S1(I)
  READ(7,10) S7(I)
5070 CONTINUE
CLOSE(1)
CLOSE(2)
CLOSE(3)
CLOSE(4)
CLOSE(5)
CLOSE(6)
CLOSE(7)
CLOSE(8)
DO 5072 I = 1 TO NI
C  CONDICION INICIAL PARA ALFA
  IA(I) = 0
5072 CONTINUE
C  SE APLICA LA MATRIZ SUMA AL VECTOR ALFA (ES EL PRODUCTO DE MATRICES)
C  Y ES LA PARTE CRUCIAL DEL CALCULO
C  PRINCIPAL. CONTIGUA LEJANA CERCANA
5090 IAA(I) = S4(I)*IA(I)+S5(I)*IA(2)+S6(I)*IA(13)+S7(I)*IA(19)
  DO 5100 I = 2, 12
    L = I - 1
    IAA(I) = S3(L)*IA(L)+S4(I)*IA(I)+S5(I)*IA(I + 1)
5100 CONTINUE
  DO 5120 I = 13, 19
    L = I - 1
    IAA(I) = S2(I-13)*IA(I-13)+S3(L)*IA(L)+S4(I)*IA(I)+S5(I)*IA(I+1)+
    +S6(I)*IA(13+L)+S7(I)*IA(19+L)
5120 CONTINUE
  DO 5130 I = 20
    L = I - 1
    IAA(I) = S1(I-19)*IA(I-19)+2(I-13)*IA(I-13)+S3(L)*IA(L)+S4(I)
    +S5(I)*IA(I+1)+S6(I)*IA(13+L)+S7(I)*IA(19+L)
5130 CONTINUE
  DO 5135 I = 115
    L = I - 1
    IAA(I) = S1(I-19)*IA(I-19)+S2(I-13)*IA(I-13)+S3(L)*IA(L)+S4(I)*IA(
    I)+S5(I)*IA(I+1)+S6(I)*IA(13+L)
5135 CONTINUE
  DO 5140 I = 134
    L = I - 1
    IAA(I) = S1(I-19)*IA(I-19)+S2(I-13)*IA(I-13)+S3(L)*IA(L)+S4(I)*IA
    (I)+S5(I)*IA(I+1)+S6(I)*IA(13+L)
5140 CONTINUE
5200 DO 5200 I = 147
  L = I - 1
  IAA(I) = S2(I-13)*IA(I-13)+S3(L)*IA(L)+S4(I)*IA(I)+S5(I)*IA
  (I+1)+S6(I)*IA(13+L)
5200 CONTINUE
  DO I = 212,223
    L = I - 1
    IAA(I) = S3(L)*IA(L)+S4(I)*IA(I)+S5(I)*IA(I+1)
  CONTINUE
5250 IAA(NI) = S3(L)*IA(L)+S4(I)*IA(I)
C  LA SOLUCION EN FORMA - EL PRODUCTO DE MATRICES
IC = IC + 1
OPEN(5,FILE='C:\FORTRAN\ME.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(10,FILE='C:\FORTRAN\MI.DAT',STATUS='OLD')
MIVAR1 = 1
FVAR1 = 1
DO 5254 I = 1, NI
  INPUT #10, MIVAR1, KM1
  INPUT #5, FVAR1, KFV
C  MATRIZ INVERSA * VECTOR FUENTE
  MIF(I) = MIVAR1 * FVAR1

```

Algoritmo ALGOM

```

    AUK() = -IAA(I) + FVARI
    IAA(I) = TAO * (MIVARI * IAA(I) - MIF(I))
5254 CONTINUE
    CLOSE(3)
    CLOSE(10)
C   LA DIFERENCIA FINAL
    DO 5270 I = 1, NI
        IAA(I) = IA(I) - IAA(I)
5270 CONTINUE
C   Control AUK() = α(A+B)α0+F
C   Al Control le restamos Alfa Punto
    DO 5256 I = 1, NI
        DIFE = IA(I) - IAA(I)
        AUK(I) = AUK(I) - DIFE / TAO
5256 CONTINUE
C   Primera Proyeccion PROYECTAR FRONTERA
C   FRONTERA 1 AL 19
    DO 5258 I = 1, M31
        IAA(I) = 0
        AUK(I) = 0
5258 CONTINUE
C   NODO INTERIORES 21 AL 113
    DO 5258 J = 1, M - 1
        I1 = J * M31 + 2
        I2 = M31 * (J + 1) - 1
C   VAL FRONTERA NODOS 20,39,58,77,96
        IAA(I1 - 1) = 0
C   VAL FRONTERA NODOS 38,57,76,95,114
        IAA(I2 + 1) = 0
C   VAL FRONTERA NODOS 20,39,58,77,96
        AUK(I1 - 1) = 0
C   VAL FRONTERA NODOS 38,57,76,95,114
        AUK(I2 + 1) = 0
5258 CONTINUE
C   NODO FRONTERA 115 AL 120
    DO 5260 I = IFSUP - M31 + 1, IFSUP - M21
        IAA(I) = 0
        AUK(I) = 0
5260 CONTINUE
    DO 5270 I = 1, M
        J = I + 1
C   VAL FRONTERA NODO 147,160,173,186,199,212
        IAA(IFSUP + M21 * I + 1) = 0
C   VAL FRONTERA NODO 147,160,173,186,199,212
        AUK(IFSUP + M21 * I + 1) = 0
C   VAL FRONTERA NODO 146,159,172,185,198,211
        IAA(IFSUP + M21 * J) = 0
C   CONTROL FRONTERA NODO 146,159,172,185,198,211
        AUK(IFSUP + M21 * J) = 0
5270 CONTINUE
C   ASIGNA VALOR A LA FRONTERA NODO 213..224
    DO 5272 I = NI - M21 + 1, NI
        IAA(I) = 0
        AUK(I) = 0
5272 CONTINUE
        IAA(121) = 0
        IAA(134) = 0
        IAA(133) = 0
        IAA(146) = 0
        AUK(121) = 0
        AUK(134) = 0
        AUK(133) = 0
        AUK(146) = 0
    DO 5274 I = 122,132
        AUK(I) = AUK(I - 19)
5274 CONTINUE
    DO 5276 I = 135,145
        AUK(I) = AUK(I + 13)
5276 CONTINUE
C   Proyeccion PROYECCION DE LA INTERFASE
C   M2=12, NODOS 121 AL 133
    DO 5278 I = IFSUP - M2, IFSUP
        IAA(I) = (IAA(I) + IAA(I + M21)) / 2
        IAA(I + M21) = IAA(I)
5278 CONTINUE
C   Proyeccion LIMITE SUPERIOR<->INFERIOR
    DO 5278 I = 1, NI
        IF (IAA(I).LT.LB) THEN
            IAA(I) = LB

```

Algoritmo ALGOM

```

ENDIF
IF (UB.LT.IAA(1)) THEN
  IAA(1) = UB
ENDIF
5278 CONTINUE
5320 MAX = IAA(1)
DO 5350 I = 2, NI
  IF (IAA(I).GT. MAX) THEN
    MAX = IAA(I)
  ENDIF
5350 CONTINUE
DO 5360 = 1, NI
  ER = ER + (IAA(I) - IA(I)) ** 2
5360 CONTINUE
ER = SQRT(ER)
FNAME='DISKRE.DAT'
5371 FORMAT(' ITERACION  ERROR  MAXIMO VALOR ')
WRITE(*,*) IC,ER,MAX
5380 FORMAT(' ITERACION',B3,'ERROR-',E16.6,'MAXIMO VALOR-',E16.6)
5390 WRITE(9,*) ER
5400 IF (ER .GT. TER) THEN
5410 DO 5411 I = 1, NI
  IA(I) = IAA(I)
  IAA(I) = 0
5411 CONTINUE
ER = 0
GOTO 5090
ELSE
GOTO 5420
ENDIF
5420 CLOSE(9)
FNAME='DISKRE.DAT'
5430 WRITE(*,*) 'PONER NOMBRE PARA SOLUCIONES DISCRETAS '
READ(*,5431) FNAME
5431 FORMAT(A10)
5440 OPEN(1,FILE='FE1.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(2,FILE=FNAME,STATUS='OLD')
5450 WRITE(2,*) M,SC,W1,W2,EPS,LD,UB,H,BW,NLNB,NI,MT,PEC,TER,RO,IC
5460 DO 5461 I = 1, IC
  READ(1,*) ER
  WRITE(2,*) ER
5461 CONTINUE
5470 DO 5471 I = 1, NI
  WRITE(2,*) IAA(I)
5471 CONTINUE
5480 DO 5481 I = 1, NI
  WRITE(2,*) CS(I)
5481 CONTINUE
5490 CLOSE(1)
CLOSE(2)
5500 RETURN
END

```