



**UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTONOMA DE MÉXICO**

---

---

**Posgrado en Ciencias de la Tierra  
Instituto de Geofísica**

**Modelo Evolutivo, con  
Descomposición de Dominios, de  
Control de Contaminantes en  
Acuíferos**

**T E S I S**

Que para optar por el grado de:  
**MAESTRO EN CIENCIAS**  
presenta

**PABLO AGUILAR TERRÉS**

**Director de tesis: Dr. Alfredo Nicolás Carrizosa  
Posgrado en Ciencias de la Tierra**



**México D.F. Agosto 2013**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.

**Dedicatoria**

A mis hijos:

Argelia, Pablo y Vladimir Cuauhtemoc Aguilar Ortega.

Mi fuente de inspiración.

## **Agradecimientos**

Quiero agradecer primeramente a mi Director de Tesis Dr. Alfredo Nicolás Carrizosa por su atinada dirección y paciencia.

A los miembros del Jurado Doctores Ismael Herrera Revilla, Ramiro García García, Oscar Escolero Fuentes y Norberto Vera Guzmán, por sus valiosos comentarios y observaciones en la revisión y corrección del original.

Al Dr. Gonzalo Alduncin G. por el tiempo concedido para realizar este trabajo, y fundamentalmente por la aportación teórica que ha realizado en este campo de las matemáticas aplicadas y la mecánica computacional.

Al Instituto de Geofísica de la Universidad Nacional Autónoma de México por el tiempo y los recursos concedidos para llevar a cabo este trabajo.

A todos mis amigos y compañeros.

# INDICE

<b>Resumen</b>	i
<b>Capítulo 1.- Introducción.</b>	1
<b>Capítulo 2.- Modelo de Flujo en Medios Porosos.</b>	6
2.1.- Modelo Mixto Dual de Flujo Darciano	6
2.2.- Formulaci3n Variacional.	7
2.3.- Aproximaci3n de Elemento Finito.	9
2.4.- Algoritmos de Punto Pr3ximo.	12
2.5.- Algoritmo de Punto Pr3ximo de dos Campos ALG I	13
<b>Capítulo 3.- Modelo de Flujo con Transporte, Difusi3n y Dispersi3n de Contaminantes.</b>	16
3.1.- Difusi3n y Dispersi3n.	16
3.2.- Hip3tesis.	17
3.3.- El Balance de Masa.	18
3.4.- Condiciones de Frontera.	20
3.5.- Modelo F3sico.	20
3.6.- Casos Importantes.	21
3.6.1.- Difusi3n Pura.	21
3.6.2.- Advecci3n Dominante.	23
3.7.- Formulaci3n Variacional.	24
3.8.- Aproximaci3n Est3ndar de Elemento Finito.	25
<b>Capítulo 4.- Control.</b>	27
4.1.- Introducci3n.	27
4.2.- Elementos de Subdiferenciales y An3lisis Convexo.	24
4.2.1.- La Funci3n Conjugada Convexa.	29
4.2.2.- Desigualdades Variacionales.	30
4.3.- Formulaciones Subdiferenciales Locales.	30
4.4.- Formulaci3n Variacional Primal Global.	31
4.5.- Dualizaci3n del Problema.	32
4.6.- Un Problema Tipo.	33
4.6.1.- Formulaci3n Variacional Local Primal.	33
4.6.2.- Formulaci3n Variacional Local Dual.	34
4.6.3.- Formulaci3n Variacional Primal.	34
4.6.4.- Formulaci3n Variacional Dual.	34
4.6.5.- Formulaci3n Variacional Mixta.	35
<b>Capítulo 5.- Modelo Estacionario de Difusi3n Advecci3n con Control de Contaminantes en un Fluido en Medios Porosos.</b>	37
5.1.- Formulaciones Variacionales Locales del Problema de Control	37
5.1.1.- Formulaci3n Variacional Primal.	38

5.1.1.1.- Control en el Interior	39
5.1.1.2.- Control en la Frontera.	40
5.1.1.3.- Condiciones de Frontera Dirichlet.	41
5.1.1.4.- Condiciones de Frontera Newman.	41
5.1.1.5.- Condiciones en la Frontera de Control.	42
5.1.1.6.- Formulaciones Subdiferenciales Duales.	42
5.2.- Formulaciones Variacionales Globales Primal y Mixta.	44
5.2.1.- Formulaci3n Variacional Primal.	45
5.2.2.- Formulaci3n Variacional Mixta.	46
5.3.- Aproximaciones de Elemento Finito.	47
5.3.1.- Aproximaciones de Elemento Finito Est3andar.	47
5.4.- Algoritmos de Resoluci3n Tipo Uzawa.	50
5.4.1.- Algoritmos del Tipo Uzawa.	50
<b>Capítulo 6.- Modelo Evolutivo de Difusi3n Advecci3n con Control de Contaminantes en un Fluido en Medios Porosos.</b>	<b>52</b>
6.1.- Formulaciones Subdiferenciales Locales del Problema Evolutivo con Control	52
6.2.- Mecanismos de Control Interior.	53
6.2.1.- Ejemplo 6.1: Un Control en el Interior.	55
6.3.- Mecanismos de Control en la Frontera.	56
6.3.1.- Condiciones de Frontera Dirichlet.	56
6.3.2.- Condiciones de Frontera Newman.	57
6.3.3.- Control en la Frontera.	57
6.4.- Formulaciones Variacionales Globales Primal y Mixta.	58
6.4.1.- Formulaci3n Variacional Primal.	58
6.4.2.-Ecuaci3n Subdiferencial Primal Global.	59
6.4.3.- Formulaci3n Variacional Mixta Dual.	60
6.4.4.- Ecuaci3n Subdiferencial Mixta Global.	61
6.4.5.- Relaci3n entre los Problemas Primal y Mixto.	61
6.5.- Propiedades Cualitativas de la Soluci3n.	62
6.5.1.- Unicidad de la Soluci3n.	63
6.5.2.- Ley de Conservaci3n de la Masa.	63
6.5.3.- Principio del M3ximo.	64
6.5.4.- Estabilidad.	65
6.6.- Aproximaci3n Semidiscreta de Elemento Finito.	65
6.6.1.- Aproximaciones Internas Semidiscretas.	65
6.6.2.- Versi3n de Coordenadas de los Problemas Semidiscretos.	67
6.6.3.- Ecuaciones Subdiferenciales Semidiscretas.	69
6.7.- Aproximaci3n Completamente Discreta.	70
6.7.1.- Espacios de Elemento Finito.	70
6.7.2.- Aproximaci3n Primal Completamente Discreta.	71
6.7.3.- aproximaci3n Mixta Completamente Discreta.	71
6.8.- El Esquema Semi-implícito de Euler como un Algoritmo ALG0	72
6.9.- Un M3todo Iterativo de Soluci3n para el Problema Mixto, algoritmo ALG 4.	74

<b>Capítulo 7.- Modelo de Flujo Miscible, Macrohíbrido, Evolutivo, con Control de Contaminantes en Acuíferos.</b>	<b>76</b>
7.1.- Introducción.	76
7.2.- Modelo de Flujo Miscible con Control de Contaminantes.	77
7.3.- Formulación Variacional Macrohíbrida del Problema de Flujo Miscible con Control de Contaminantes.	79
7.3.1.- Descomposición de Dominios.	79
7.3.2.- Formulación Variacional Macrohíbrida Mixta (Velocidad – Presión) del problema de Flujo.	79
7.3.3.- Formulaciones Variacionales Macrohíbridas del Problema de Control de Difusión y Advección de Contaminantes.	81
7.3.4.- Formulación Variacional Macrohíbrida Mixta Primal del Problema de Difusión y Advección de Contaminantes.	82
7.3.5.- Formulación Variacional Macrohíbrida Mixta Dual del Problema de Difusión y Advección de Contaminantes.	82
7.4.- Aproximaciones Macrohíbridas de Elemento Finito.	84
7.4.1.- Aproximación Macrohíbrida de Elemento Finito del Problema de Control de Difusión y Advección de Contaminantes.	84
7.4.2.- Aproximación Semidiscreta Macrohíbrida Mixta Primal de Elemento Finito del Problema de Control de Difusión y Advección de Contaminantes.	85
7.4.3.- Aproximación Semidiscreta Macrohíbrida Mixta Dual de Elemento Finito del Problema de Control de Difusión y Advección de Contaminantes.	85
7.5.- Algoritmos de Resolución Tipo Uzawa de los Problemas Macrohíbridos Mixtos Primal y Dual de Control de Difusión y Advección de Contaminantes.	87
7.5.1.- Forma Subdiferencial de los Problemas Mixtos Primal y Dual.	87
7.5.2.- Espacios Producto.	88
7.5.3.- Formas Mixtas Primal y Dual Abstractas.	89
7.5.4.- Esquema Primal de Integración en el Tiempo.	90
7.5.5.- Esquemas Duales de Integración en el Tiempo.	91
7.5.6.- Esquemas de Euler Duales de integración en el Tiempo.	92
7.5.7.- Esquemas de Separación de Operadores de Integración en el Tiempo.	94
<b>Capítulo 8.- Experimentación Numérica.</b>	<b>96</b>
8.1.- Refinamiento de la Malla y del paso del Tiempo.	99
8.2.- Experimento 1.	102
8.3.- Resultados del Modelo de Control.	103
8.5.- Figuras Serie 1. Evolución del Sistema sin Control.	110
8.6.- Figuras Serie 2. Evolución del Sistema con Control.	140
<b>Capítulo 9.- Conclusiones.</b>	<b>105</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>106</b>

## RESUMEN

Aguilar Terrés Pablo. Modelo Evolutivo con Descomposición de Dominios de Control de Contaminantes en Acuíferos. Posgrado en Ciencias de la Tierra UNAM. Asesor Dr. Alfredo Nicolás Carrizosa. México 2009.

El agua de los acuíferos representa el principal recurso de agua potable para uso humano; por lo que un manejo adecuado de los acuíferos es de importancia estratégica para el país. Este manejo debe contemplar su recarga, su potencial de almacenamiento, la extracción de agua, la descarga a otros acuíferos o a ríos, lagos o al mar, así como las fuentes de contaminación y el movimiento de estos contaminantes, su control o remediación y la conservación del medio ambiente. La sobreexplotación y la contaminación son los principales riesgos que corren los acuíferos por lo que el control de los contaminantes y su flujo en el acuífero es de gran importancia para evitar la pérdida o inutilización del recurso.

En este trabajo el objetivo central es establecer un modelo matemático computacional de control del flujo, transporte y difusión de contaminantes en acuíferos. Para este fin establecemos un dominio del problema, el acuífero o parte de él, y restricciones en el valor de la concentración,  $u(x; t)$ , que debe satisfacer el contaminante en el acuífero,  $c_1 \leq u(x, t) \leq c_2$ . Lo que nos conduce a acciones de control en el interior y en la frontera de control, las cuales son acciones dadas por el modelo. Los conceptos fundamentales desarrollados en este trabajo son: Flujo en medios porosos. Difusión y Transporte de Contaminantes. Subdiferenciales y Control. Modelo Estacionario de Difusión y Transporte con Control de Contaminantes en Medios Porosos. Modelo Evolutivo de Difusión y Transporte con Control de Contaminantes en Medios Porosos. Descomposición de Dominios. Y finalmente lograr un Modelo Evolutivo de Flujo Miscible, Macrohíbrido (con Descomposición de Dominios), con Control de Contaminantes en Acuíferos. Todos éstos son modelos mixtos de elemento finito, los cuales se resuelven con algoritmos de resolución de punto próximo tipo Uzawa.

Se presentan resultados numéricos que muestran la efectividad del modelo evolutivo propuesto para un acuífero con una configuración dada de pozos. Con los resultados se pueden determinar los lugares dónde deben ponerse los pozos de control, para que la concentración del contaminante satisfaga las restricciones impuestas de antemano para que la pluma de contaminantes no llegue a los pozos de agua potable. Consideramos que el responsable del manejo de un acuífero debería contar con un modelo computacional de este tipo, puesto que la autorización de nuevos pozos de agua potable traería consigo la necesidad de nuevos pozos de control, si se quiere mantener la calidad del agua del acuífero.



# Capítulo 1

## INTRODUCCIÓN

Del agua en el planeta el 97.25% corresponde a los océanos, la cual contiene una gran cantidad de sales, el resto es agua 'dulce', de este 2.75% las dos terceras partes se encuentran en los casquetes polares y en los glaciares. El agua subterránea representa el 0.68% del total, en lagos se encuentra el 0.01%, mientras que en arroyos y ríos el 0.0001%. Esto significa que menos de 1% del agua está disponible para uso humano, tanto para consumo directo como para la agricultura, el uso urbano, la industria y otros usos. Si contamos con la necesidad de mantener el ecosistema, el agua disponible se reduce aún más.

En México existe una distribución heterogénea del recurso agua, debido en parte a sus condiciones geográficas y climatológicas. El potencial de agua disponible en nuestro país, según la Comisión Nacional del Agua, es de 476 kilómetros cúbicos, de los cuales por su calidad, el 5% es excelente, el 22% es aceptable, el 49% poco contaminada, el 2% tiene presencia de tóxicos, el 15% contaminada y el 7% muy contaminada. Por sus usos, el 77% del agua disponible tiene un uso agrícola, el 13% es para abastecimiento público y el 10% para la industria [1].

El agua de los acuíferos representa el principal recurso de agua potable para uso humano, por lo que un manejo adecuado de los acuíferos es de importancia estratégica para el país, este manejo debe contemplar su recarga, su potencial de almacenamiento, la extracción de agua, la descarga a otros acuíferos o a ríos, lagos o al mar, así como las fuentes de contaminación y el movimiento de estos contaminantes, su control o remediación y la conservación del medio ambiente.

La sobreexplotación y la contaminación son los principales riesgos que corren los acuíferos por lo que el control de los contaminantes y su flujo en el acuífero es de principal importancia para evitar la pérdida o inutilización del recurso.

El establecimiento de grandes ciudades y su crecimiento anárquico sobre sus acuíferos y zonas de recarga, la agricultura con el uso intensivo de agroquímicos, las zonas industriales donde los desechos son puestos en basureros sin protección alguna, los tiraderos de basura, los sistemas de drenaje sin el mantenimiento adecuado, etc. son fuentes de contaminación de los acuíferos subyacentes.

Hay una amplia variedad de sustancias, identificadas como contaminantes, que han sido encontradas en aguas subterráneas. Ellas incluyen, sustancias químicas orgánicas sintéticas, hidrocarburos, cationes inorgánicos, aniones inorgánicos, patógenos y radionúcleos. La mayoría de esos materiales son solubles en agua en diferentes grados. Algunos de los compuestos orgánicos son poco solubles y podrían existir en ambas formas, una disuelta y otra fase insoluble no acuosa, la cual puede también migrar a través del medio poroso. En la referencia [2] podemos ver una tabla, (Tabla 1.2), con más de 250 sustancias contaminantes encontradas en aguas subterráneas, clasificadas según su uso, lo cual puede ayudar a localizar la fuente del contaminante. Esta tabla contiene 40 hidrocarburos aromáticos, 26 hidrocarburos oxigenados, 113 hidrocarburos con elementos específicos por ejemplo con N, P, S, Cl, Br, I, F, otros 15 hidrocarburos como gasolinas y detergentes, 27 cationes metálicos, 10 aniones y no metales, microorganismos y 19 radionúcleos. Los cationes y aniones ocurren en la naturaleza y puede venir de fuentes naturales ó antropogénicas, algunos de los radionúcleos pueden venir de fuentes naturales, de usos industriales y depósitos de desperdicios radiactivos, así como de pruebas nucleares. En la misma referencia la Tabla 1.3, lista los contaminantes orgánicos encontrados en agua subterránea adyacente a un depósito de desperdicios.

En bajas concentraciones la mayoría de estas sustancias son incoloras, insaboras e inoloras. La presencia de estas sustancias sólo pueden ser detectada cuando muestras de agua subterránea son colectadas y analizadas. Para determinar la presencia y concentración de cada sustancia, o tipos de sustancias, tienen que ser empleadas técnicas analíticas específicas, lo que hace muy costoso el análisis. Pero ¿cuál sería la concentración permisible de estas sustancias? La calidad del agua depende de su uso, el agua para uso industrial puede no ser tan pura como el agua para beber, algunos máximos de concentraciones de sustancias contaminantes se establecen en las normas, (p. ej. Norma Oficial Mexicana) sin que estas normas alcancen todo el amplio rango de las sustancias contaminantes.

Un buen manejo del acuífero debe contar, entre otras cosas, con un modelo de flujo y de transporte de contaminantes en el acuífero, que permita experimentar con diferentes alternativas de manejo y diseñar estrategias para resolver problemas de uso del agua y de contaminación del agua subterránea. Esto puede realizarse mediante prueba y error, o estableciendo una formulación del problema que minimice una funcional sujeta a restricciones físicas, económicas o de otro tipo.

En este trabajo el objetivo central es establecer un modelo de control del flujo, transporte y difusión de contaminantes en acuíferos, para este fin establecemos un dominio del problema  $\Omega$ , el acuífero o parte de él, y restricciones en el valor de la concentración,  $u(x, t)$ , del contaminante en el acuífero,  $c_1 \leq u(x, t) \leq c_2$ , y en una parte de la frontera, que llamaremos frontera de control. Lo que nos conduce a acciones de control en el interior y en la frontera de control, acciones que son dadas por el modelo.

En el capítulo 2, **Flujo en Medios Porosos**, establecemos un modelo mixto de flujo en medios porosos, en el cual se encuentran simultáneamente la presión y la velocidad como una función de la posición, en este caso solo consideramos el caso estacionario. Sobre este modelo de flujo se construirán en los siguientes capítulos los modelos de transporte y de control.

En el capítulo 3, **Modelo de Flujo con Transporte y Difusión de Contaminantes**, desarrollamos el modelo físico de la difusión y dispersión de un soluto (que puede ser sólido o líquido) sobre un fluido en movimiento dentro de un medio poroso, visto desde un punto de vista macroscópico mediante la mecánica de medios continuos, hasta establecer la ecuación diferencial parcial que gobierna el flujo, transporte y difusión de contaminantes en un medio poroso.

En el capítulo 4, **Control**, central en el presente trabajo de investigación, presentaremos algunos elementos de análisis convexo, como son el de subdiferencial, subgradientes y superpotencial, los que nos sirven para modelar el interior y las condiciones de frontera de un problema, no necesariamente potencial, con restricciones. Así como el de dualización mediante la gráfica inversa del subdiferencial, para obtener la función conjugada o polar del potencial.

Aplicaremos estos conceptos a un problema, entonces, mediante la apropiada fórmula de Green obtendremos la formulación variacional primal global del problema. Posteriormente dualizando obtendremos las formulaciones variacionales mixta y dual. Para comprender la potencia de este método desarrollado en [3] y para definir los espacios funcionales donde tiene lugar, lo aplicaremos a un problema tipo.

En el capítulo 5, **Modelo Estacionario de Difusión Advección con Control de Contaminantes en un Fluido en Medios Porosos**, aplicaremos el método, estudiado en el capítulo anterior, al problema de control de contaminantes en un fluido en medios porosos. Estableceremos dos tipos de restricciones o controles, el control en el interior del dominio  $\Omega$  y el control en la frontera  $\partial\Omega_C$ . El método consiste en modelar los mecanismos de control en términos de ecuaciones subdiferenciales primales locales, a los que corresponden desigualdades variacionales locales. Se realiza la dualización de los controles mediante la gráfica inversa de los subdiferenciales. Y mediante la integración sobre todo el dominio del problema, aplicando la función de Green a una combinación de la formulación primal y dual obtenemos la formulación variacional global del problema.

Una vez con la formulación variacional del problema, obtendremos la aproximación de elemento finito. Proponemos obtener la solución numérica usando algoritmos iterativos del tipo Uzawa.

En el capítulo 6, **Modelo Evolutivo de Difusión Advección con Control de Contaminantes en un Fluido en Medios Porosos**, aplicaremos la misma metodología vista en el capítulo anterior, para construir los modelos de control y sus correspondientes formulaciones variacionales, así como las aproximaciones de elemento finito y los algoritmos de resolución numérica.

En primer lugar modelaremos los mecanismos de control en el interior y en la frontera mediante ecuaciones subdiferenciales locales, procediendo a construir las formulaciones variacionales, pseudoinstantáneas, globales primal y mixta, la última con restricciones de control dualizadas, las cuales serán la base del análisis y los esquemas numéricos. Escribiremos estas formulaciones variacionales en su forma subdiferencial para obtener la analogía con los modelos mixtos abstractos primal y dual. Hacemos el análisis cualitativo de existencia, unicidad y estabilidad del problema.

Para la discretización en el tiempo, aplicamos el esquema semi-implícito de Euler al modelo primal de transporte y el esquema  $\theta$  de punto medio al modelo mixto. Identificamos el esquema semi-implícito con un algoritmo de proximidad que corresponde a un algoritmo primal tipo Uzawa *ALG 0* y se formula un algoritmo mixto de resolución tipo Uzawa, *ALG 4*, para el esquema  $\theta$  de punto medio, via operadores de proximidad.

En el capítulo 7, **Modelo de Flujo Miscible, Macrohíbrido, con Control de Contaminantes en acuíferos**, integraremos en un modelo de flujo miscible con control de contaminantes en medios porosos, directamente aplicable a acuíferos, lo estudiado en el Capítulo 2 de Flujo en Medios Porosos, con lo estudiado en los Capítulos 3, 4, 5 y 6 sobre Flujo de Contaminantes y sobre Control.

Para considerar la heterogeneidad y anisotropía de las propiedades físicas y la gran escala espacial de un acuífero real y por la exactitud requerida en la aproximación de los campos de velocidad, presión y concentración, se hace indispensable la macrohibridización o descomposición de dominios del problema, donde el sistema es descompuesto en varios subsistemas que interactúan y se sincronizan a través de sus interfaces. Cada subsistema contiene un problema mas pequeño ó más simple de resolver que el problema original. Aprovechando de manera natural el cómputo en paralelo o en sistemas distribuidos que se desarrolla actualmente.

Con las formulaciones macrohíbridas mixta primal y mixta dual del problema de flujo miscible, aplicamos la teoría de resolventes para desigualdades variacionales para generar algoritmos de penalidad dualizada introduciendo operadores de proximidad o de punto próximo. Para la evolución en el tiempo de problemas mixtos esto corresponde a esquemas de integración numérica en el tiempo del tipo Euler, Douglas Rachford y Peaceman Rachford.

En el capítulo 8, **Experimentación Numérica**. Para la aplicación al control de contaminantes en un acuífero consideraremos un problema clásico. El modelo que usamos para modelar el control de contaminantes en el acuífero es el modelo macrohíbrido mixto primal, con el cual encontramos simultáneamente el campo de presiones, el de velocidades y de concentraciones y nos permite jugar con las fuentes y sumideros de flujo de contaminantes para el control de contaminantes en el acuífero. Discutimos los resultados del modelo de control para un problema clásico.

En el capítulo 9, **Conclusiones**, hacemos la discusión de los resultados gene-

rales del trabajo, las conclusiones a que llegamos y las perspectivas a lograr en un futuro próximo.

## Capítulo 2

### MODELO DE FLUJO EN MEDIOS POROSOS

#### 2.1 Modelo Mixto Dual de Flujo Darciano

Consideremos un dominio fijo  $\Omega \subset R^n, n = 1, 2, 3$  con frontera  $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$  lisa a trozos, dentro de un medio poroso, por ejemplo un acuífero en el subsuelo, el medio es caracterizado por una cantidad  $\phi$ , la porosidad del medio, definida como el cociente del volumen del fluido entre el volumen total.

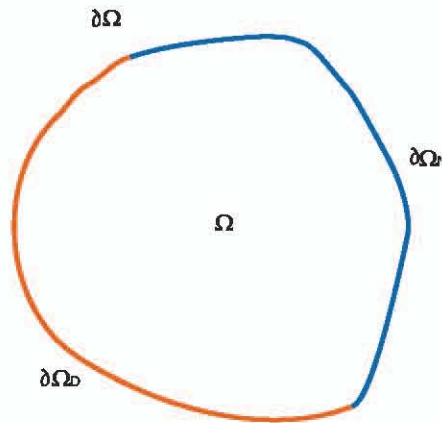


Fig.2.1.- Dominio  $\Omega$  con fronteras Dirichlet y Newman.

El movimiento del fluido cumple con la Ley de Darcy y la conservación de la masa, es decir:

$$\mu \tilde{K}^{-1} \mathbf{u} = -grad p + \rho \mathbf{g} \quad (2.1)$$

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \mathbf{u}) = \hat{q} \quad (2.2)$$

con las condiciones de frontera:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_n \quad (2.3)$$

$$p = \widehat{p} \quad (2.4)$$

donde:

$\mu$  = Viscosidad dinámica.

$\mathbf{u} = \phi \mathbf{u}_p$  = Velocidad de Darcy.

$\mathbf{u}_p$  = Velocidad promedio.

$\phi$  = Porosidad del medio.

$\widetilde{K}$  = Tensor de permeabilidad.

$\widetilde{p}$  = Presión.

$\rho$  = Densidad del fluido.

$\mathbf{g}$  = Aceleración de la gravedad.

$\widehat{q}$  = Término para las fuentes y sumideros en el fluido.

$\mathbf{n}$  = Vector unitario normal a la frontera.

$u_n$  = Velocidad normal en la frontera Newman.

$\widehat{p}$  = Presión prescrita en la frontera Dirichlet.

Si suponemos que el fluido es incompresible entonces el modelo físico para el flujo en medios porosos, expresado como modelo mixto, es:

$$(MP) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } \mathbf{u}, p \text{ en } \Omega \text{ tal que:} \\ \mu \widetilde{K}^{-1} \mathbf{u} = -gradp + \rho \mathbf{g} \\ div \mathbf{u} = \widehat{q} \\ \text{Con las condiciones de frontera:} \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \widehat{u}_N \text{ en } \partial\Omega_N \\ p = \widehat{p} \text{ en } \partial\Omega_D. \end{array} \right. \quad (2.5)$$

## 2.2 Formulación Variacional

Introducimos los espacios funcionales:

$$\mathbf{V}(\Omega) = H(Div; \Omega) = \{ \mathbf{v} \in L^2(\Omega) : div \mathbf{v} \in L^2(\Omega), \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \in L^2(\partial\Omega_N) \} \quad (2.6)$$

para el campo de velocidades.

$$Y(\Omega) = L^2(\Omega) \text{ para el campo de presiones.}$$

sean además:

$$K^{-1} \in L^\infty(\Omega), \rho \in L^2(\Omega), \hat{q} \in L^2(\Omega), \hat{u}_N \in L^2(\partial\Omega_N), \hat{p} \in L^2(\partial\Omega_D) \quad (2.7)$$

Multiplicando la primera ecuación en (2.5) por  $\mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega)$ , y la segunda por  $q \in Y(\Omega)$ , integrando por partes, aplicando la fórmula de Green y la identidad vectorial:

$$\operatorname{div}(\varphi \mathbf{v}) = \varphi \operatorname{div}(\mathbf{v}) + \operatorname{grad} \varphi \cdot \mathbf{v} \quad (2.8)$$

obtenemos:

$$\int_{\Omega} \mu K^{-1} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = - \int_{\Omega} \operatorname{grad} p \cdot \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega \quad (2.9)$$

y

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{u} \, q = \int_{\Omega} \hat{q} \, q \quad (2.10)$$

pero por (2.8):

$$- \int_{\Omega} \operatorname{grad} p \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = - \int_{\Omega} \operatorname{div}(p \mathbf{v}) \, d\Omega + \int_{\Omega} p \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega \quad (2.11)$$

por el teorema de la divergencia y tomando en cuenta las condiciones de frontera Dirichlet y Newman:

$$- \int_{\Omega} \operatorname{div}(p \mathbf{v}) \, d\Omega = - \int_{\partial\Omega} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega = - \int_{\partial\Omega_D} \gamma p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_N} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega \quad (2.12)$$

pero  $\gamma p = \hat{p}$  en  $\partial\Omega_D$  y  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = u_N$  en  $\partial\Omega_N$ , entonces:

$$- \int_{\Omega} \operatorname{div}(p \mathbf{v}) \, d\Omega = - \int_{\partial\Omega_D} \hat{p} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_N} p u_N \, d\partial\Omega \quad (2.13)$$

Entonces de (2.9):

$$\int_{\Omega} \mu K^{-1} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = - \int_{\partial\Omega_D} \hat{p} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_N} p u_N \, d\partial\Omega + \int_{\Omega} p \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega \quad (2.14)$$

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{u} \, q = \int_{\Omega} \hat{q} \, q \quad (2.15)$$



Consideremos el conjunto de admisibilidad de Newman  $K_{\hat{u}_n}$  definido como:

$$K_{\hat{u}_n} = \{ \mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega) \mid \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \hat{u}_N, \text{ sobre } \partial\Omega_N \} \quad (2.16)$$

Entonces la formulación variacional mixta dual es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (\mathbf{u}, p) \in K_{\hat{u}_n} \times Y(\Omega), \text{ tal que:} \\ \int_{\Omega} \mu K^{-1} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\partial\Omega_D} \hat{p} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_N} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega + \int_{\Omega} p \operatorname{div} \mathbf{v} d\Omega \\ + \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in K_{\hat{u}_n} \\ \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{u} q = \int_{\Omega} \hat{q} q, \quad \forall q \in Y(\Omega) \end{array} \right. \quad (2.17)$$

### 2.3 Aproximación de Elemento Finito

Consideremos una sucesión de espacios de elemento finito mixto de velocidad - presión, de dimensión finita,  $V_h, Y_h$ , definidos sobre una malla de paso  $h$ , que particiona el dominio original  $\Omega$ , tal que:

$$\mathbf{V}_h = [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n] \subset \mathbf{V}(\Omega) = H(\operatorname{Div}; \Omega) \quad (2.18)$$

$$Y_h = [\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_m] \subset Y(\Omega) = L^2(\Omega)$$

Donde  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$  son funciones vectoriales linealmente independientes (funciones base) que generan el espacio  $\mathbf{V}_h$ , el campo de velocidades.

Y  $\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_m$  son funciones linealmente independientes, funciones base, que generan el espacio  $Y_h$ , el campo de presiones.

Sean  $\{\alpha_i\}$  y  $\{\lambda_k\}$  los conjuntos de coeficientes correspondientes de la velocidad y presión, entonces expresamos los vectores velocidad y presión como:

$$u_h = \sum_{j=1}^{n_h} \alpha_j \phi_j \in V_h$$

$$\begin{aligned}
p_h &= \sum_{k=1}^{m_h} \lambda_k \zeta_k \in Y_h \\
\text{similarmente} &: \\
v_h &= \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i \in V_h \\
q_h &= \sum_{k=1}^{m_h} \mu_k \zeta_k \in Y_h
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Sustituyendo en las ecuaciones (2.17), obtenemos:

$$\left\{ \begin{aligned}
&\int_{\Omega} \mu K^{-1} \sum_{j=1}^{n_h} \alpha_j \phi_j \cdot \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i d\Omega = - \int_{\partial\Omega_D} \widehat{p} \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega \\
&- \int_{\partial\Omega_N} \left( \sum_{k=1}^{m_h} \lambda_k \zeta_k \right) \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega \\
&+ \int_{\Omega} \sum_{k=1}^{m_h} \lambda_k \zeta_k \operatorname{div} \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i d\Omega + \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i d\Omega \\
&\int_{\Omega} \operatorname{div} \sum_{j=1}^{n_h} \alpha_j \phi_j \sum_{k=1}^{m_h} \mu_k \zeta_k = \int_{\Omega} \widehat{q} \sum_{k=1}^{m_h} \mu_k \zeta_k
\end{aligned} \right. \tag{2.20}$$

Sea:

$$A_{ij} = \int_{\Omega} \mu K_i^{-1} \phi_i \cdot \phi_j d\Omega \tag{2.21}$$

la integral del producto de las funciones base vectoriales  $\phi_i$  y  $\phi_j$  multiplicadas por la permeabilidad del medio y la viscosidad del fluido. Entonces el término:

$$\int_{\Omega} \mu K^{-1} \sum_{j=1}^{n_h} \alpha_j \phi_j \cdot \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i d\Omega = \underline{\alpha}_j \cdot A_{ij}^T \cdot \beta_i = A_{ij} \underline{\alpha}_j \cdot \beta_i = \mathbf{A} \underline{\alpha} \cdot \underline{\beta} \tag{2.22}$$

Similarmente, sean:

$$\underline{f}_j = \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \phi_j d\Omega - \int_{\partial\Omega_D} \widehat{p} \phi_j \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega \tag{2.23}$$

$$L_{mj} = - \int_{\Omega} \zeta_m \operatorname{div} \phi_j d\Omega \tag{2.24}$$

$$T_{kj} = \int_{\partial\Omega_N} \zeta_k \phi_j \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega \quad (2.25)$$

$$q_k = \int_{\Omega} \widehat{q} \zeta_k \quad (2.26)$$

de modo que:

$$\int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i d\Omega - \int_{\partial\Omega_D} \widehat{p} \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega = \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\beta} \quad (2.27)$$

entonces los terminos:

$$\int_{\Omega} \sum_{k=1}^{m_h} \lambda_k \zeta_k \operatorname{div} \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i d\Omega = \mathbf{L}^T \boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\beta} \quad (2.28)$$

$$\int_{\partial\Omega_N} \left( \sum_{k=1}^{m_h} \lambda_k \zeta_k \right) \sum_{i=1}^{n_h} \beta_i \phi_i \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega = \mathbf{T}^T \boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\beta} \quad (2.29)$$

entonces:

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \sum_{j=1}^{n_h} \alpha_j \phi_j \sum_{k=1}^{m_h} \mu_k \zeta_k = \mathbf{L} \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\mu} = -\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\mu} \quad (2.30)$$

Los conjuntos discretos de admisibilidad de Newman son definidos en términos de la velocidad normal prescrita en la frontera  $\widehat{u}_h$  por:

$$\mathbf{K}_{\widehat{u}_h} = \left\{ \boldsymbol{\beta} \in \mathfrak{R}^{n_h} : \sum_{j=1}^{n_h} \beta_j \phi_j \cdot \mathbf{n} = \widehat{u}_h \right\} \quad (2.30)$$

Entonces el modelo en la aproximación de elemento finito, del flujo en medios porosos, expresado como modelo mixto dual es:

$$(MP_h) \begin{cases} \text{Encontrar } (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}) \in \mathbf{K}_{\widehat{u}_h} \times \mathfrak{R}^{m_h} \text{ tal que:} \\ \mathbf{A} \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\beta} = \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\beta} - (\mathbf{L}^T \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{T}^T \boldsymbol{\lambda}) \cdot \boldsymbol{\beta}, & \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{\widehat{u}_h} \\ \mathbf{L} \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\mu} = -\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\mu}, & \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathfrak{R}^{m_h} \end{cases} \quad (2.32)$$

## 2.4 Algoritmos de Punto Prójimo

Para la solución del problema discreto mixto de elemento finito (2.32) desarrollaremos un algoritmo del tipo dualidad penalización de Uzawa [4] que consiste en caracterizar ecuaciones subdiferenciales monótonas en terminos de resolventes, es decir problemas de aproximación de punto fijo y asociarlas con un proceso iterativo de aproximaciones de punto prójimo [5].

Primero expresaremos el problema discreto de elemento finito ( $MP_h$ ) en forma subdiferencial [3] introduciendo los operadores multivaluados:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\boldsymbol{\beta}) &= \mathbf{A}\boldsymbol{\beta} + \partial I_{k_{\hat{u}_{n_h}}}(\boldsymbol{\beta}) - \mathbf{f}, & \boldsymbol{\beta} \in \mathfrak{R}^{n_h} \\ \partial \mathbf{G}^*(\boldsymbol{\mu}) &= \partial(I_{\{0\}})^*(\boldsymbol{\mu}) - \mathbf{q}, & \boldsymbol{\mu} \in \mathfrak{R}^{m_h} \end{aligned} \quad (2.33)$$

el problema (2.32) toma la forma:

$$(MP_h) \begin{cases} \text{Encontrar } (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}) \in \mathbf{K}_{n_h} \times \mathfrak{R}^{m_h} \text{ tal que:} \\ -\mathbf{L}^T \boldsymbol{\lambda} \in \mathcal{A}(\boldsymbol{\alpha}) \\ \mathbf{L}\boldsymbol{\alpha} \in \partial \mathbf{G}^*(\boldsymbol{\lambda}) \end{cases} \quad (2.34)$$

donde el operador primal  $\mathcal{A}$  es monótono maximal y estamos suponiendo que los tensores de movilidad son simétricos, uniformemente positivos definidos con inversa  $\mathbf{K}^{-1} \in \mathbf{L}^\infty(\Omega)$ . El subdiferencial  $\partial(I_{\{0\}})^*(\boldsymbol{\mu})$  del funcional conjugado de la indicatriz de cero,  $I_{\{0\}}$ , es trivialmente el subdiferencial cero.

Para sistematizar la derivación del algoritmo simplificamos la forma del problema como un problema mixto generalizado:

$$(M) \begin{cases} \text{Encontrar } (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}^*) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \times \mathcal{D}(\partial \mathbf{G}^*) \text{ tal que:} \\ -\Lambda^T \boldsymbol{\lambda}^* \in \mathcal{A}(\boldsymbol{\alpha}) \\ \Lambda \boldsymbol{\alpha} \in \partial \mathbf{G}^*(\boldsymbol{\lambda}^*) \end{cases} \quad (2.35)$$

para lograr esto establecemos, para los campos primal y dual, las siguientes equivalencias:

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\alpha} &\simeq \{\alpha_j\} \in \mathbf{V} = \Re^{m_h} \\
 \boldsymbol{\lambda}^* &\simeq \{\lambda_i\} \in Y = \Re^{m_h}
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

Los operadores abstractos  $\mathcal{A} : V \rightarrow 2^V$  son monótonos maximales,  $\Lambda \in \mathcal{L}(V, Y)$  operadores lineales con transpuesta  $\Lambda^T \in \mathcal{L}(Y, V)$ , y  $\partial G^* : Y \rightarrow 2^Y$ , son subdiferenciales monótonos con dominio primal  $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \{\boldsymbol{\beta} \in V : \mathcal{A}(\boldsymbol{\beta}) \neq \emptyset\} = K_{\hat{u}_{n_h}}$  y dominio dual  $\mathcal{D}(\partial G^*) = \{\mathbf{v}^* \in Y : \partial G^*(\mathbf{v}^*) \neq \emptyset\} = \Re^{m_h}$  y corresponden en nuestro esquema de elemento finito a:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}(\boldsymbol{\alpha}) &\simeq \{\mathcal{A}(\boldsymbol{\alpha})\} \\
 \Lambda \boldsymbol{\alpha} &\simeq (\{\Lambda \boldsymbol{\alpha}\}) \\
 \Lambda^T \boldsymbol{\lambda}^* &\simeq \{L^T \boldsymbol{\lambda} + T^T \boldsymbol{\lambda}\} \\
 \partial G^*(\boldsymbol{\lambda}^*) &\simeq (\{\partial G^*(\boldsymbol{\lambda}^*)\})
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

## 2.5 Algoritmo de punto próximo de dos campos, ALG I

Sea  $r > 0$  un parámetro real, multiplicando por  $r$  la ecuación dual del problema mixto general  $(M)$  y sumando  $\boldsymbol{\lambda}^*$ , obtenemos la expresión aumentada equivalente:

$$\boldsymbol{\lambda}^* + r\Lambda \boldsymbol{\alpha} \in (I + r\partial G^*)(\boldsymbol{\lambda}^*) \tag{2.38}$$

El operador resolvente del subdiferencial  $\partial G^*$  es una contracción firme definida [4, 27] por:

$$J_{\partial G^*}^r \equiv (I + r\partial G^*)^{-1} = \text{Pr } ox_{rG^*} = I - \text{Pr } ox_{rG \circ (\frac{1}{r})I} \tag{2.39}$$

Donde el proximal  $\text{Pr } ox_{rG \circ (\frac{1}{r})I}$  es el operador relativo al superpotencial primal  $rG \circ (\frac{1}{r})I : Y \rightarrow \Re \cup \{+\infty\}$  definido por:

$$\text{Pr } \text{ox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I}(v^*) = \arg\left(\inf_{\delta^* \in \mathcal{D}(G \circ (\frac{1}{r})I)} \left\{ \frac{1}{2} \|\delta^* - v^*\|^2 + rG\left(\frac{1}{r}\right)\delta^* \right\}\right) \quad (2.40)$$

Entonces el problema mixto aumentado puede ser reformulado en términos del operador proximal, la formulación aumentada trae como consecuencia la regularización y la aceleración de la convergencia cuando esta asociada a un algoritmo tipo Uzawa, [35, 27]. El problema mixto aumentado queda como:

$$(M_r) \begin{cases} \text{Encontrar } (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}^*) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \times \mathcal{D}(\partial G^*) : \\ -\Lambda^T(\boldsymbol{\lambda}^* - \text{Pr } \text{ox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I})(\boldsymbol{\lambda}^* + r\Lambda\boldsymbol{\alpha}) \in (\mathcal{A} + r\Lambda^T\Lambda)(\boldsymbol{\alpha}) \\ \boldsymbol{\lambda}^* = (I - \text{Pr } \text{ox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I})(\boldsymbol{\lambda}^* + r\Lambda\boldsymbol{\alpha}) \end{cases} \quad (2.41)$$

El algoritmo de punto próximo de dos campos para el problema mixto aumentado  $(M_r)$ , ALG I, es:

$$(ALG I) \begin{cases} \text{Dado } \boldsymbol{\alpha}^0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A}), \boldsymbol{\lambda}_0^* \in \mathcal{D}(G^*) \\ \text{Conocidos } \boldsymbol{\alpha}^m, \boldsymbol{\lambda}^m, m \geq 0 \\ \text{Calcular: } \boldsymbol{\alpha}^{m+1}, \boldsymbol{\lambda}^{m+1}, \text{ tal que:} \\ -\Lambda^T(\boldsymbol{\lambda}_m^* - \text{Pr } \text{ox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I})(\boldsymbol{\lambda}_m^* + r\Lambda\boldsymbol{\alpha}^m) \in (\mathcal{A} + r\Lambda^T\Lambda)(\boldsymbol{\alpha}^{m+1}) \\ \boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* = (I - \text{Pr } \text{ox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I})(\boldsymbol{\lambda}_m^* + r\Lambda\boldsymbol{\alpha}^{m+1}) \end{cases} \quad (2.42)$$

Este algoritmo corresponde de hecho a uno de dualidad penalización exacta para nuestro problema de flujo. Entonces, para hacer explícito el algoritmo, tomando en cuenta la definición de los operadores (2.33) y de las equivalencias (2.36) y (2.37), el algoritmo ALG I de nuestro problema de flujo toma la forma:

$$\widetilde{ALGI} \left\{ \begin{array}{l}
 \text{Dados } \boldsymbol{\alpha}^0 \in \mathbf{K}_{\hat{u}_{n_h}}, \lambda^0 \in \mathfrak{K}^{m_h} \\
 \text{conocidos } \boldsymbol{\alpha}^m, \lambda^m, m \geq 0 \\
 \text{Calcular } \boldsymbol{\alpha}^{m+1}, \lambda^{m+1} \text{ tal que:} \\
 (\mathbf{A} + r\mathbf{L}^T\mathbf{L} + r\mathbf{T}^T\mathbf{T})\boldsymbol{\alpha}^{m+1} \cdot \boldsymbol{\beta} = \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\beta} - \mathbf{L}^T(\lambda^m + r\mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\beta}, \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0_h} \\
 \lambda^{m+1} = \lambda^m + r\mathbf{L}\boldsymbol{\alpha}^{m+1} + r\mathbf{q}
 \end{array} \right. \quad (2.43)$$

## Capítulo 3

# MODELO DE FLUJO CON TRANSPORTE, DIFUSIÓN Y DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES

### 3.1 Difusión y dispersión

La difusión es un proceso molecular mediante el cual dos o más sustancias, debido a la agitación y choques de sus moléculas, se penetran mutuamente de tal manera que si inicialmente estaban en un orden bien establecido, por ejemplo en el espacio, al ponerse en contacto y dejar que evolucione el sistema espontáneamente, al final del proceso tendremos una mezcla homogénea, en la que es imposible distinguir cada una de las sustancias, es decir alcanzan un estado de máxima entropía.

La difusión puede darse ente gases, líquidos, sólidos y sus mezclas. La difusión al ser un proceso molecular depende del número de moléculas de cada sustancia por unidad de volumen, es decir de la concentración, de la temperatura y en menor medida de la presión.

Al evolucionar el sistema se genera una corriente de masa de las sustancias interactuantes de tal manera que si consideramos una superficie imaginaria de área unidad, la corriente está dad por [6]:

$$\mathbf{i} = -\rho \tilde{D} [\mathbf{grad}c + (k_T/T)\mathbf{grad}T + (k_p/p)\mathbf{grad}p] \quad (3.1)$$

El coeficiente  $\tilde{D}$  es llamado el coeficiente de difusión o de transferencia de masa, nos da el flujo de difusión cuando solo está presente el gradiente de concentración. El flujo de difusión debido a gradientes de temperatura está dado por  $k_T \tilde{D}$ , el coeficiente de difusión térmica. El último término debe ser tomado en cuenta sólo cuando hay un considerable gradiente de presión en el fluido, causado por un campo externo y el coeficiente  $k_p \tilde{D}$  es llamado el coeficiente de barodifusión.

En el caso de flujo en medios porosos, como es el caso de un acuífero, debemos considerar también la dispersión mecánica del soluto debida al movimiento del fluido en el medio poroso, en este caso podemos distinguir la dispersión longitudinal debida al avance del fluido en la dirección promedio de flujo, y la dispersión transversal,



debida a que a escala de los poros la trayectoria real de flujo diverge de la trayectoria promedio de flujo. Los coeficientes de dispersión mecánica estan dados por:

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha_L |\mathbf{v}| \\ D_T &= \alpha_T |\mathbf{v}| \end{aligned} \quad (3.2)$$

Donde  $|\mathbf{v}|$  es la magnitud de la velocidad promedio y  $\alpha_L$  y  $\alpha_T$  son la dispersividad longitudinal y transversal del medio. Entonces el tensor de difusión dispersión  $\tilde{D}$ , con  $D^*$  como la difusión molecular, queda como [2], [36]:

$$\begin{aligned} D_{ii} &= D_L \frac{(v_i)^2}{|\mathbf{v}|^2} + D_T \frac{(v_j)^2}{|\mathbf{v}|^2} + D^* \\ D_{ij} &= (D_L - D_T) \frac{v_i v_j}{|\mathbf{v}|^2} + D^*, i \neq j. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Cuando hay fuerzas externas, es decir el sistema no evoluciona espontáneamente, entonces la distribución de las sustancias puede variar espacial y temporalmente, y en algunos casos llegar a un estado estacionario.

El problema a resolver es encontrar la concentración de cada sustancia en cada punto del espacio y su evolución en el tiempo. Un caso importante es poder llevar al sistema a un estado final previsto de antemano. Otro caso es forzar al sistema a que en su evolución pase por una serie de estados predeterminados y llegar al estado final deseado.

En nuestro caso trataremos de la difusión de un soluto ( que puede ser sólido o líquido) sobre un fluido en movimiento dentro de un medio poroso, visto desde un punto de vista macroscópico mediante la mecánica de medios continuos.

Para el desarrollo de este modelo en primer lugar consideraremos el modelo físico de transporte y difusión de solutos en un fluido en medios porosos dejando para más adelante la cuestión del control y la posible aplicación a un caso real.

### 3.2 Hipótesis:

Las hipótesis o supuestos sobre los que se desarrollará nuestro modelo son las siguientes:

1).- El movimiento del fluido se supone conocido, ya sea porque fué medido experimentalmente, o es producto de otro modelo, o ambas cosas. Además de conocido se supone que cumple con la Ley de Darcy y la conservación de la masa, es decir:

$$\begin{aligned}\mu K^{-1} \mathbf{w} &= -grad p + \rho \vec{g} \\ div \mathbf{w} &= \hat{q}\end{aligned}\quad (3.4)$$

donde  $\mu$  es la viscosidad dinámica,  $\mathbf{w}$  es la velocidad de Darcy:

$$\mathbf{w} = \phi \mathbf{w}_p \quad (3.5)$$

con  $\phi$  la porosidad y  $\mathbf{w}_p$  la velocidad promedio del fluido en un elemento de volumen en el medio poroso,  $K$  es la permeabilidad,  $p$  la presión  $\rho$  la densidad del fluido  $\mathbf{g}$  la aceleración de la gravedad y  $\hat{q}$  el término para las fuentes o sumideros en el fluido.

2).- El modelo a desarrollar será para predecir el movimiento del soluto.

3).- La concentración del soluto no afecta de manera importante el movimiento del fluido.

4).- El proceso es isotérmico y la presión no varía mucho durante el movimiento del fluido.

5).- La difusión del soluto, entonces, está dada por la Ley de Fick, es decir:

$$\mathbf{s} = - \tilde{D} grad u \quad (3.6)$$

donde  $\tilde{D}$  es el tensor de difusión dispersión,  $u$  es la concentración del soluto o sea la masa de soluto por unidad de volumen de fluido y  $\mathbf{s}$  es el vector de corriente de masa de soluto.

6).- La base del Modelo de Transporte y Difusión es el balance de masa del soluto.

### 3.3 El Balance de Masa

Consideremos un cuerpo  $\mathcal{B}(t)$ , o sea la región de  $R^3$  que ocupa el cuerpo en el tiempo  $t \in (0, T)$  dentro del dominio de flujo  $\Omega$ , consideremos un punto cualquiera  $x$  en  $\mathcal{B}(t)$  contenido en  $\Omega$ .

La masa de soluto dentro de  $\mathcal{B}(t)$  es dada por:

$$M_s = \int_{\mathcal{B}(t)} \phi u d\Omega \quad (3.7)$$

Donde  $\phi$  es la porosidad del medio,  $u$  la concentración de soluto dentro del fluido, es decir la masa de soluto por unidad de volumen del fluido. El cambio de la masa de soluto,  $M_s$ , está dado por la masa que se gana o pierde en fuentes o sumideros  $f$ , menos la masa que fluye a través de la frontera del cuerpo,  $-\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}$ . Aplicando a  $B(t)$  el balance de masa:

$$\frac{dM_s}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{B(t)} \phi u d\Omega = \int_{B(t)} f d\Omega - \int_{\partial B(t)} \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} d\Omega \quad (3.8)$$

Usando el teorema de Reynolds [7] :

$$\frac{D}{Dt} \int_V \varphi dV = \int_V \left\{ \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \text{div}(\varphi \mathbf{v}) \right\} dV \quad (3.9)$$

obtenemos:

$$\frac{d}{dt} \int_{B(t)} \phi u d\Omega = \int_{B(t)} \left( \frac{\partial}{\partial t} \phi u + \text{div}(\phi u \mathbf{v}) \right) d\Omega \quad (3.10)$$

Entonces:

$$\int_{B(t)} \left( \frac{\partial}{\partial t} \phi u + \text{div}(\phi u \mathbf{v}) \right) d\Omega = \int_{B(t)} f d\Omega - \int_{\partial B(t)} \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} d\Omega \quad (3.11)$$

Aplicando el teorema de localización [8], como  $x$  es un punto cualquiera del dominio  $\Omega$  y el término de difusión esta dado por la ley de Fick (3.6), obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi u) + \text{div}(\phi u \mathbf{v}) = f + \text{div}(\underset{\sim}{D} \text{grad } u) \quad (3.12)$$

Para un medio poroso, sea  $\phi \mathbf{v}_p = \phi \mathbf{v} = \mathbf{w}$  la velocidad de Darcy, y si suponemos que la porosidad del medio no cambia con el tiempo:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (3.13)$$

Pero:  $\text{div}(u \mathbf{w}) = \mathbf{w} \cdot \text{grad } u + u \text{div } \mathbf{w}$  y  $\text{div } \mathbf{w} = q$ , entonces:

$$\text{div}(u \mathbf{w}) = \mathbf{w} \cdot \text{grad } u + q u \quad (3.14)$$

Entonces la ecuación diferencial parcial que rige la dispersión y difusión de solutos contaminantes en medios porosos acorde con las hipótesis antes mencionadas es:

$$\phi \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{D} \operatorname{grad} u) + \mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u + qu = f \quad (3.15)$$

### 3.4 Condiciones de frontera

Para que este sea un problema bien planteado y pueda resolverse para un caso particular es necesario además de la ecuación diferencial que gobierna el fenómeno físico, conocer las condiciones de frontera y las condiciones iniciales del caso particular. Consideraremos condiciones de frontera tipo Dirichlet,  $\partial\Omega_D$ , es decir cuando el valor de la función de concentración es conocido en toda o parte de la frontera del cuerpo, y condiciones de frontera tipo Newman,  $\partial\Omega_N$ , o sea cuando conocemos el flujo de la función a través de toda o parte de la frontera del cuerpo, o una combinación de ambas, con  $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$  y  $\partial\Omega_D \cap \partial\Omega_N = \emptyset$ . Las condiciones de frontera son:

$$\begin{aligned} u &= \hat{u} \in \partial\Omega_D \\ -D \operatorname{grad} u \cdot \mathbf{n} &= \hat{w}_n \in \partial\Omega_N \end{aligned} \quad (3.16)$$

Y la condición inicial:

$$u(0) = \hat{u}_0 \in \Omega \quad (3.17)$$

### 3.5 Modelo físico

En resumen el modelo físico para transporte y difusión de contaminantes en un fluido en medios porosos es el siguiente:

$$(MF) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } c \in \Omega \times (0, T) \rightarrow R \text{ tal que:} \\ \phi \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\underset{\sim}{D} \operatorname{grad} u) + \mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u + qu = f \\ u = \hat{u} \in \partial\Omega_D \\ -D \operatorname{grad} u \cdot \mathbf{n} = \hat{w}_n \in \partial\Omega_N \\ u(0) = \hat{u}_0 \in \Omega \\ \text{con el flujo dado por} \\ \mu \underset{\sim}{K}^{-1} \mathbf{w} = -\operatorname{grad} p + \rho \mathbf{g} \\ \operatorname{div} \mathbf{w} = q \end{array} \right. \quad (3.18)$$

### 3.6 Casos Importantes

Del modelo general de difusión advección desarrollado en el párrafo anterior podemos deducir dos casos importantes. el primero cuando la difusión domina a los demás términos de la ecuación, es decir cuando  $\left| \operatorname{div}(\underset{\sim}{D} \operatorname{grad} u) \right| \gg |\mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u|$ , un caso extremo es el de difusión pura,  $\mathbf{w} = 0$ . El otro caso importante es el de advección dominante, es decir, cuando el término de advección domina a los demás términos de la ecuación,  $|\mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u| \gg \left| \operatorname{div}(\underset{\sim}{D} \operatorname{grad} u) \right|$ , otra forma más conveniente de denotar esto es  $-\varepsilon \operatorname{div}(\mathbf{D} \nabla u) + \mathbf{w} \cdot \nabla u = f$  cuando  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Enseguida estudiaremos en detalle estos dos casos.

#### 3.6.1 Difusión Pura

En el caso de que el fluido se encuentre en reposo, el movimiento del soluto se dá unicamente por difusión. En adelante denotaremos por  $u(x, t)$  al campo de concentraciones y por  $\mathbf{w}(x, t)$  al campo de velocidades, en este caso la ecuación de difusión advección:

$$\phi \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\underset{\sim}{D} \operatorname{grad} u) + \mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u + qu = f \quad (3.19)$$

donde  $u$  es la concentración,  $\mathbf{w}$  el campo de velocidades, si  $\mathbf{w} = \mathbf{0}$ , entonces  $\operatorname{div} \mathbf{w} = q = 0$  y de la ecuación (3.19) resulta:

$$\phi \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\tilde{D} \operatorname{grad} u) = f \quad (3.20)$$

Esta ecuación la podemos plantear en forma mixta como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } \mathbf{s}, u \in \Omega \times [0, T], \text{ tal que:} \\ \\ \mathbf{s} = -\mathbf{D} \operatorname{grad} u \\ \\ \phi \frac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{s} = f \\ \\ \text{con la condición de frontera e inicial:} \\ \\ u = \hat{u} \quad \text{en } \partial\Omega_D \\ \\ \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} = w_s \quad \text{en } \partial\Omega_N \\ \\ u(0) = \hat{u}_0 \quad \text{en } \Omega \times \{0\} \end{array} \right. \quad (3.21)$$

Matemáticamente este problema tiene la misma estructura que el de flujo en medios porosos estudiado en el Capítulo 2:

$$P) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } \mathbf{u}, p \text{ en } \Omega \text{ tal que:} \\ \\ \mu \tilde{K}^{-1} \vec{u} = -\operatorname{grad} p + \rho \vec{g} \\ \\ \operatorname{div} \vec{u} = \vec{q} \\ \\ \text{Con las condiciones de frontera:} \\ \\ \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}}_s = \hat{u}_q \text{ en } \partial\Omega_N \\ \\ p = \hat{p} \text{ en } \partial\Omega_D \end{array} \right.$$

por lo que podemos aplicar la metodología desarrollada en el capítulo anterior, es decir la formulación variacional, la aproximación de elemento finito hasta llegar al algoritmo de resolución para el caso estacionario, ALG I, el cual se puede implementar computacionalmente. Interpretando el proceso iterativo como pasos del tiempo.

### 3.6.2 Advección Dominante

En el caso de advección dominante la contribución del término advectivo,  $\mathbf{w} \cdot \text{grad } u$ , es mucho mayor que el término de difusión, lo que se logra cuando  $|\mathbf{w} \cdot \text{grad } u| \gg \left| \text{div}(\tilde{D} \text{grad } u) \right|$  en la ecuación de advección difusión:

$$\phi \frac{\partial u}{\partial t} - \varepsilon \text{div}(\tilde{D} \text{grad } u) + \mathbf{w} \cdot \text{grad } u + qu = f \quad (3.22)$$

Cuando  $|\mathbf{w} \cdot \text{grad } u| \gg \left| \text{div}(\tilde{D} \text{grad } u) \right| \rightarrow 0$  el comportamiento de esta ecuación tiende a ser de tipo hiperbólico, pueden aparecer efectos de capa límite y discontinuidades en el interior del dominio del problema. Cuando se hace la aproximación de elemento finito la matriz resultante no es simétrica debido a la contribución del término  $\mathbf{w} \cdot \text{grad } u$ . Esta es la razón por la que los esquemas numéricos estandar pueden degenerar produciendo resultados alejados de la realidad. Mas precisamente se ha comprobado que métodos de elemento finito estandar para problemas hiperbólicos no trabajan bien en casos donde la solución exacta no es lisa, si la solución exacta tiene un salto discontinuo, entonces la solución de elemento finito exhibe grandes oscilaciones espurias aún en lugares lejanos de la discontinuidad, de tal manera que la solución no es cercana a la exacta practicamente en ningún sitio. Esto es de particular preocupación porque en muchas ecuaciones parabólicas interesantes, la solución no es lisa.

Se han desarrollado métodos no estandar de elemento finito, con propiedades de convergencia satisfactorios, como son los de "upwind", "difusión a lo largo de la corriente", el de Galerkin discontinuo y otros que se aplican a problemas hiperbólicos de primer orden con poca difusión como lo es el de difusión advección cuando  $\text{div}(\tilde{D} \text{grad } u) \rightarrow 0$ . Y en el caso cuando  $\left| \text{div}(\tilde{D} \text{grad } u) \right| = 0$ , o sea cuando en la ecuación se anula el termino de difusión y solamente tenemos el término advectivo, tenemos el caso de una ecuación puramente hiperbólica.

Como un ejemplo de modelo problema, consideraremos el caso estacionario:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \in \Omega \text{ tal que:} \\ -\text{div}(\mathbf{D}\nabla u) + \mathbf{w} \cdot \nabla u = f \quad \text{en } \Omega \\ u = \hat{u} \quad \text{en } \partial\Omega_D \\ \mathbf{D}\nabla u \cdot \mathbf{n} = g, \quad \text{en } \partial\Omega_N \end{array} \right. \quad (3.23)$$

Donde  $\Omega \subset R^n$ ,  $n \geq 1$ , con frontera  $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$ ,  $\partial\Omega_D \cap \partial\Omega_N = \emptyset$ ,  $\mathbf{w}$  es el campo de velocidades conocido,  $\hat{u}$  y  $g$  son las condiciones de frontera Dirichlet y Newman respectivamente, suponemos además que  $\text{div}\mathbf{w} = \mathbf{0}$  en  $\Omega$  y  $\mathbf{w} \cdot \mathbf{n} \geq 0$  en  $\partial\Omega_N$ .

### 3.7 Formulación Variacional

Multiplicando la primer ecuación de (3.23) por  $v$ , usando la formula de Green:

$$\text{div}(v\mathbf{D}\nabla u) = v\text{div}(\mathbf{D}\nabla u) + \mathbf{D}\nabla u \cdot \nabla v \quad (3.24)$$

Integrando por partes, usando el teorema de la divergencia e incorporando la condición de frontera Newman obtenemos:

$$\int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla u \cdot \nabla v d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g\gamma v d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{w} \cdot \nabla u)v d\Omega = \int_{\Omega} f v d\Omega \quad (3.25)$$

Entonces la formulación variacional primal del problema está dada por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \in K_{\hat{u}} \quad \text{tal que:} \\ \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla u \cdot \nabla v d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{w} \cdot \nabla u)v d\Omega = \int_{\Omega} f v d\Omega + \int_{\partial\Omega_N} g\gamma v d\Omega \\ \forall v \in K_0 \end{array} \right. \quad (3.26)$$

Donde  $K_{\hat{u}}$  es el conjunto de espacios admisibles que satisfacen la condición de frontera de Dirichlet prescrita  $\hat{u}$  sobre  $\partial\Omega_D$  :

$$K_{\hat{u}} = \{v \in H^1(\Omega) : \gamma v = \hat{u} \text{ en } \partial\Omega_D\} \quad (3.27)$$

$H^1(\Omega)$  es un espacio de Hilbert - Sobolev,  $\gamma \in \mathcal{L}(H^1(\Omega), H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega))$  es el operador traza correspondiente,  $K_0$  es el subespacio lineal de  $H^1(\Omega)$  de funciones con traza cero en  $\partial\Omega_D$ .

De la propiedad del término de advección:

$$\int_{\Omega} (\mathbf{w} \cdot \nabla v)v d\Omega \geq 0, \quad \forall v \in K_0 \quad (3.28)$$

se sigue que los resultados clásicos de existencia y unicidad de soluciones son válidos en este caso [10], es decir existe una única solución para el problema (3.26).



### 3.8 Aproximación Estandar de Elemento Finito

Consideremos una familia de subespacios de dimensión finita  $V_h \subset H^1(\Omega)$ ,  $h > 0$  con dimensión  $m_h \rightarrow \infty$  cuando  $h \rightarrow 0$ , y una familia correspondiente  $K_{\hat{u}_h} \subset V_h$ , de conjuntos convexos que aproximan  $K_{\hat{u}}$ . El problema discreto asociado a (3.26) es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u_h \in K_{\hat{u}_h} \text{ tal que:} \\ \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla u_h \cdot \nabla v_{h_0} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla v_{h_0} d\Omega \\ = \int_{\Omega} f v_{h_0} d\Omega + \int_{\partial\Omega_N} g \gamma v_{h_0} d\partial\Omega, \quad \forall v_{h_0} \in k_{0_h} \end{array} \right. \quad (3.29)$$

El cual es conocido como aproximación interna abstracta. De la propiedad (3.28), (3.29) posee una solución única, y bajo suficientes condiciones de consistencia y convergencia para la familia  $\{K_{\hat{u}_h}\}_{h>0}$ , el problema (3.29), define una sucesión convergente en  $H^1(\Omega)$  a la solución de (3.26), es decir:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|u_h - u\|_{H^1(\Omega)} = 0 \quad (3.30)$$

Como es conocido, bajo convergencia uniforme esta condición es válida, pero la presencia del término de advección condiciona la capacidad de este esquema discreto estandar para aproximar puntualmente la solución exacta cuando  $\left| \operatorname{div}(\underset{\sim}{D} \operatorname{grad} u) \right| \rightarrow 0$ .

Consideremos la aproximación estandar discutida anteriormente:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u_h \in K_{\hat{u}_h} \text{ tal que:} \\ \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla u_h \cdot \nabla v_{h_0} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla v_{h_0} d\Omega \\ = \int_{\Omega} f v_{h_0} d\Omega + \int_{\partial\Omega_N} g \gamma v_{h_0} d\partial\Omega, \quad \forall v_{h_0} \in k_{0_h} \end{array} \right. \quad (3.31)$$

Como una aplicación procedamos a deducir las versiones en  $R^{m_h}$  del problema discreto estandar en términos de una base de  $V_h$  es decir:

$$V_h = \operatorname{span} \{ \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{m_h} \} \quad (3.32)$$

Entonces, expresamos  $u_h$  y  $v_{h_0}$  en términos de sus vectores coordenadas  $\boldsymbol{\alpha}$  y  $\boldsymbol{\beta} \in R^{m_h}$ , obtenemos el problema discreto estandar:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } \boldsymbol{\alpha} \in K^{m_h} \text{ tal que:} \\ \boldsymbol{\beta} \cdot (\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{B}\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{b}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in k_0^{m_h} \end{array} \right. \quad (3.33)$$

donde  $k^{m_h}$ , y respectivamente  $k_0^{m_h}$ , son las versiones en  $R^{m_h}$  de  $K_{\hat{u}_h}$  y de  $K_{0_h}$ . Las matrices  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$  y el vector  $\mathbf{b}$ , estan definidos para  $i = 1, 2, \dots, m_h$  como:

$$A_{ij} = \int_{\Omega} \mathbf{D} \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i d\Omega \quad (5.34)$$

$$B_{ij} = \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla \varphi_j \varphi_i d\Omega \quad (3.35)$$

$$b_i = \int_{\Omega} f \varphi_i d\Omega + \int_{\partial\Omega_N} g \varphi_i d\partial\Omega \quad (3.36)$$

## Capítulo 4

### CONTROL

#### 4.1 Introducción

En este capítulo, central en el presente trabajo de investigación, presentaremos algunos elementos de análisis convexo como son el de subdiferencial, subgradientes y superpotencial para modelar el interior y las condiciones de frontera de un problema no necesariamente potencial, con interior convexo, con valores en la frontera y restricciones. Así como el de dualización mediante la gráfica inversa del subdiferencial para obtener la función conjugada o polar del superpotencial.

Aplicaremos estos conceptos a un problema donde los subgradientes son el operador elíptico. Las restricciones y condiciones en la frontera son el superpotencial. Entonces, mediante la formula de Green apropiada obtendremos la formulación variacional primal global del problema. Posteriormente dualizando el interior, las condiciones en la frontera y las restricciones y mediante la formula de Green obtendremos las formulaciones variacionales globales mixta y dual del problema.

Para comprender la potencia de este método y para definir los espacios funcionales donde tiene lugar, lo aplicaremos a un problema tipo.

Armados con esta tecnología aplicaremos este método para el planteamiento y formulación de nuestro problema de difusión advección con control de contaminantes en un fluido en medios porosos, modelando mediante subdiferenciales el interior, las condiciones de frontera y las restricciones de control, obteniendo las formulaciones variacionales primal y dual mixta del problema y su aproximación de elemento finito.

#### 4.2 Elementos de Subdiferenciales y Análisis Convexo

En términos generales las ecuaciones que gobiernan el interior, las condiciones de frontera y las restricciones de un problema dado, pueden ser expresadas en términos de subdiferenciales de funciones convexas. Las ecuaciones subdiferenciales corresponden directamente a la formulación variacional local del problema, desde la cual pueden obtenerse formulaciones locales y globales alternativas.

Los conceptos fundamentales para la formulación variacional local son los de subdiferencial de una función convexa y el de función conjugada convexa [3]. El

subdiferencial de una función convexa es una generalización del concepto de derivada y se define como sigue:

Sea  $f : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  una función convexa, no necesariamente diferenciable, con dominio efectivo:

$$\mathfrak{D}(f) = \{\xi \in R : f(\xi) < +\infty\}, \text{ no vacío y cerrado.} \quad (4.1)$$

Entonces se dice que  $f$  es *subdiferenciable* en un punto  $\eta \in R$  si existe un real  $\eta^* \in R$  tal que:

$$f(\xi) \geq f(\eta) + \eta^*(\xi - \eta) \quad \forall \xi \in R \quad (4.2)$$

Esto es,  $f$  es subdiferenciable en  $\eta$ , si hay una función afín  $\xi \mapsto f(\eta) + \eta^*(\xi - \eta)$  con pendiente  $\eta^*$  y que pasa por  $f(\eta)$ , cuya gráfica está bajo la gráfica de  $f$  (Fig.4.1).

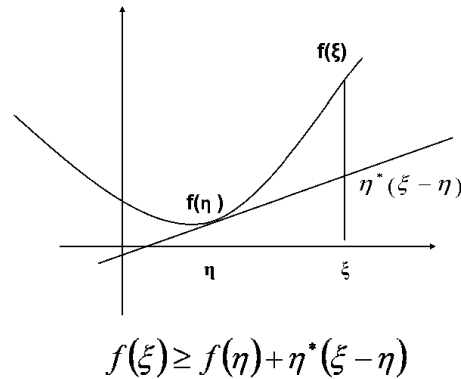


Fig.4.1.- Ilustración del concepto de subdiferencial.

El conjunto de reales  $\eta^*$ , llamados los subgradiientes de  $f$  en  $\eta$ , definen el *subdiferencial* de  $f$  en  $\eta$ , que se denota  $\partial f(\eta)$ , es decir:

$$\partial f(\eta) = \{\eta^* \in R : f(\xi) \geq f(\eta) + \eta^*(\xi - \eta) \quad \forall \xi \in R\} \quad (4.3)$$

El subdiferencial  $\partial f$  es monótono y, en general, un mapeo multivaluado de  $R \rightarrow 2^R$ , la familia de subconjuntos de  $R$ .

Si  $f$  no es subdiferenciable en  $\eta$ , entonces  $\partial f(\eta) = \emptyset$ , este sería el caso si y solo si  $\eta \notin \mathfrak{D}(f)$ .

$f$  es diferenciable en  $\eta$  si y solo si tiene un único subgradiente en  $\eta$ , tal que  $\partial f(\eta) = \{f'(\eta)\}$ .

La función primitiva de  $\partial f$ , es decir  $f$ , es llamada subpotencial o superpotencial  $f$ .

#### 4.2.1 La función conjugada convexa

El concepto de función conjugada convexa surge como una formalización elegante y general de los conceptos de dualidad y optimización. La dualización nos permite asociar un problema dual con un problema variacional y estudiar la relación entre estos problemas. Esto es usado en varios campos de las matemáticas aplicadas. En mecánica, los problemas primal y dual son dos formas bien conocidas de principios de conservación.

En análisis numérico, el problema dual puede ayudar a resolver el problema primal, pero también nos habilita para encontrar una solución generalizada de problemas variacionales que no tienen una solución clásica [16]

Para obtener la dualización de las condiciones y restricciones de un problema, lo hacemos mediante la conjugada convexa. La función conjugada convexa o función polar, la obtenemos mediante la gráfica inversa del subdiferencial para obtener el subdiferencial de la función conjugada y mediante una integración la función conjugada convexa.

Sea  $f : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  una función convexa, su función polar o conjugada convexa se define como [16]:

$$\begin{aligned} f^* & : R \rightarrow R \cup \{+\infty\} && \text{tal que:} \\ f^*(\xi^*) & = \sup \{\xi^* \xi - f(\xi)\}; && \xi \in R \end{aligned} \tag{4.4}$$

La cual es una función convexa con dominio efectivo  $\mathfrak{D}(f^*)$ , no vacío y cerrado. Del análisis convexo tenemos el siguiente resultado, el cual es la base de la dualización:

*Lemma 4.1* Sea  $f : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  una función convexa con dominio efectivo  $\mathfrak{D}(f) \neq \emptyset$  y cerrado. Entonces:

$$\eta \in \mathfrak{D}(f) : \eta^* \in \partial f(\eta) \Leftrightarrow \eta^* \in \mathfrak{D}(f^*) : \eta \in \partial f^*(\eta^*) \tag{4.5}$$

donde  $f^* : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  es la función conjugada (polar) de  $f$ .  $\square$ .

### 4.2.2 Desigualdades variacionales

Por lo anterior, la gráfica inversa del subdiferencial de  $f$ ,  $\partial f$ , es la gráfica del subdiferencial de  $f^*$ ,  $\partial f^*$ . De ahí que una ecuación subdiferencial primal es caracterizada por su ecuación subdiferencial dual. De acuerdo con la definición (4.3), las ecuaciones (4.5) tienen la siguiente interpretación:

$$\begin{aligned} \eta &\in \mathfrak{D}(f) : f(\xi) - f(\eta) \geq \eta^*(\xi - \eta) \quad \forall \xi \in \mathfrak{D}(f) \quad \text{si y sólo si :} \\ \eta^* &\in \mathfrak{D}(f^*) : f^*(\xi^*) - f^*(\eta^*) \geq \eta(\xi^* - \eta^*) \quad \forall \xi^* \in \mathfrak{D}(f^*) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Las cuales son las desigualdades variacionales locales correspondientes, primal y dual, en términos de los superpotenciales  $f$  y  $f^*$ .

## 4.3 Formulaciones subdiferenciales locales

Consideremos un problema de valores en la frontera no lineal y con restricciones, con dominio  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega \subset R^n$ ,  $n = 1, 2, 3$ , este puede ser expresado en términos de ecuaciones subdiferenciales locales (punto a punto) [17], [18], las cuales corresponden directamente a la formulación variacional primal local del problema:

$$u(x) \in \mathfrak{D}(\phi(x; \cdot)) : -P(u)(x) + f(x) \in \partial\phi(x; u(x)), \quad x \in \Omega, \quad (4.7)$$

$$\gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi(x; \cdot)) : -\frac{\partial}{\partial \nu}(u)(x) \in \partial\psi(x; \gamma u(x)), \quad x \in \partial\Omega. \quad (4.8)$$

donde  $P$  es el operador elíptico,  $\gamma$  y  $\frac{\partial}{\partial \nu}$  los operadores de frontera Dirichlet y Newman respectivamente,  $f$  son las fuentes interiores y  $\partial\phi(x; \cdot) : R^m \rightarrow 2^{R^m}$  y  $\partial\psi(x; \cdot) : R^n \rightarrow 2^{R^n}$ ,  $m, n = 1, 2, 3$  son los subdiferenciales locales que modelan el interior, las condiciones de frontera y restricciones del problema. Suponemos que para cada  $x \in \Omega$  y  $x \in \partial\Omega$  los superpotenciales  $\phi(x; \cdot) : R^m \rightarrow R^m \cup \{+\infty\}$  y  $\psi(x; \cdot) : R^n \rightarrow R^n \cup \{+\infty\}$  son funciones convexas con dominio efectivo  $\mathfrak{D}(\phi(x; \cdot)) \subset R^m$  y  $\mathfrak{D}(\psi(x; \cdot)) \subset R^n$  no vacíos y cerrados.

De acuerdo a la definición de subdiferencial (4.3), obtenemos las desigualdades variacionales locales:

$$\left\{ \begin{array}{l} u(x) \in \mathfrak{D}(\phi(x; \cdot)) : \\ P(u)(x) \cdot (v(x) - u(x)) + \phi(x; v(x)) - \phi(x; u(x)) \geq f(x) \cdot (v(x) - u(x)) \\ \forall v(x) \in \mathfrak{D}(\phi(x; \cdot)), \quad x \in \Omega, \\ \gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi(x; \cdot)) : \psi(\gamma(v(x))) - \psi(\gamma(u(x))) \geq -\frac{\partial}{\partial v}(u)(x) \cdot (v(x) - u(x)), \\ \forall \gamma v(x) \in \mathfrak{D}(\psi(x; \cdot)), \quad x \in \partial\Omega \end{array} \right. \quad (4.9)$$

#### 4.4 Formulación variacional primal global

De la formulación variacional local primal, usando para la integración por partes la formula de Green [19]:

$$\int_{\Omega} P(u) \cdot v d\Omega = a(u, v) - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial \nu}(u) \cdot \gamma v d\partial\Omega, \quad (4.10)$$

$$u \in V_P = \{v \in V(\Omega) : P(v) \in L^2(\Omega)\},$$

donde  $a(u, v)$  es una forma bilineal,  $V(\Omega)$  es un espacio de Banach reflexivo denso y continuamente incrustado en  $L^2(\Omega)$ , obtenemos la formulación variacional primal global del problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } f \in L^2(\Omega), \text{ encontrar } u \in K \text{ tal que:} \\ a(u, v - u) + \int_{\Omega} \phi(x; v) d\Omega - \int_{\Omega} \phi(x; u) d\Omega + \int_{\Omega} \psi(x; \gamma v) d\Omega - \int_{\Omega} \psi(x; \gamma u) d\Omega \\ \geq \int_{\Omega} f \cdot (v - u) d\Omega \\ \forall v \in K \end{array} \right. \quad (4.11)$$

Donde el conjunto de campos primales admisibles es:

$$K = \{v \in V(\Omega) : \phi(\cdot; v(\cdot)) \in L^1(\Omega), \psi(\cdot; \gamma v(\cdot)) \in L^1(\Omega)\} \quad (4.12)$$

#### 4.5 Dualización del problema

La formulación variacional alternativa del problema es construida mediante la dualización de condiciones y restricciones. Aplicando el *Lemma* 3.1 obtenemos las formulaciones variacionales locales mixta dual del problema, de (4.7) y (4.8), usando (4.5) :

$$\begin{aligned} -P(u)(x) + f(x) &\in \mathfrak{D}(\phi^*(x; \cdot)) : \\ u(x) &\in \partial\phi^*(x; -P(u)(x) + f(x)), \quad x \in \Omega, \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial\nu}(u)(x) &\in \mathfrak{D}(\psi^*(x; \cdot)) : \\ \gamma u(x) &\in \partial\psi^*(x; -\frac{\partial}{\partial\nu}(u)(x)), \quad x \in \partial\Omega, \end{aligned} \quad (4.14)$$

esta es la formulación local dual de el problema. Expresándola en términos de desigualdades variacionales:

$$\begin{aligned} -P(u)(x) + f(x) &\in \mathfrak{D}(\phi^*(x; \cdot)) : \\ \phi^*(x; -P(v)(x) + f(x)) - \phi^*(x; -P(u)(x) + f(x)) &\geq u(x) \cdot (-P(v)(x) + P(u)(x)) \\ \forall -P(v)(x) + f(x) &\in \mathfrak{D}(\phi^*(x; \cdot)), \quad x \in \Omega, \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial\nu}(u)(x) &\in \mathfrak{D}(\psi^*(x; \cdot)) : \\ \psi^*(x; -\frac{\partial}{\partial\nu}(v)(x)) - \psi^*(x; -\frac{\partial}{\partial\nu}(u)(x)) &\geq \gamma u(x) \cdot (-\frac{\partial}{\partial\nu}(v)(x) + -\frac{\partial}{\partial\nu}(u)(x)) \\ \forall -\frac{\partial}{\partial\nu}(u)(x) &\in \mathfrak{D}(\psi^*(x; \cdot)), \quad x \in \partial\Omega. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Entonces, integrando por partes y usando la fórmula de Green (4.10), obtenemos directamente la formulación global dual del problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \in K^* \text{ tal que} \\ a(v, u) - a(u, u) + \int_{\Omega} \phi^*(x; -P(v) + f)d\Omega - \int_{\Omega} \phi^*(x; -P(u) + f)d\Omega + \\ \int_{\partial\Omega} \psi^*(x; -\frac{\partial}{\partial\nu}(v))d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega} \psi^*(x; -\frac{\partial}{\partial\nu}(u))d\partial\Omega \geq 0 \quad \forall v \in K^* \end{array} \right. \quad (4.17)$$



donde  $K^*$  es el conjunto de campos primales dualmente admisibles:

$$K^* = \left\{ \begin{array}{l} v \in V_P : \phi^*(x; -P(v)(x) + f(x)) \in L^1(\Omega), x \in \Omega; \\ \psi^*(x; -\frac{\partial}{\partial v}(v)(x)) \in L^1(\partial\Omega), x \in \partial\Omega \end{array} \right\} \quad (4.18)$$

## 4.6 Un Problema Tipo

Consideremos el problema de valores en la frontera con restricciones en el interior dadas, con el operador elíptico  $P = -\Delta u(x) + w(x) \cdot \nabla u(x)$ , el cual corresponde al modelo matemático local, (punto a punto), del problema de difusión advección, antisimétrico, con  $w(x)$  el campo de velocidades asociado, con una restricción u obstáculo interior y valores en la frontera Dirichlet y Newman prescritos, de (4.7) y (4.8) tenemos:

### 4.6.1 Formulación variacional local primal

$$u(x) \in \mathfrak{D}(\phi(x; \cdot)) = \{\xi \in R : \xi \geq h(x)\} :$$

$$\Delta u(x) - w(x) \cdot \nabla u(x) + f(x) \in \partial\phi(x; u(x)) = \begin{cases} (-\infty, 0], & u(x) = h(x), \\ \{0\}, & u(x) > h(x), \end{cases}$$

$$x \in \Omega.$$

(4.19)

$$\gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi(x; \cdot)) = \{\hat{u}(x)\} : -\frac{\partial u}{\partial n}(x) \in \partial\psi(x; \gamma u(x)) = R, x \in \partial\Omega_D \quad (4.20)$$

$$\gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi(x; \cdot)) = R : -\frac{\partial u}{\partial n}(x) \in \partial\psi(x; \gamma u(x)) = \{\hat{g}(x)\}, x \in \partial\Omega_N. \quad (4.21)$$

Donde  $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$  y  $\partial\Omega_D \cap \partial\Omega_N = \emptyset$ ,  $h$  es la restricción u obstáculo interior,  $\hat{u}$  y  $\hat{g}$  son los valores en las fronteras Dirichlet y Newman respectivamente y:

$$\lambda^* = \Delta u(x) - w(x) \cdot \nabla u(x) + f(x) \quad (4.22)$$

es una función de control a priori desconocida.

#### 4.6.2 Formulación variacional local dual

De acuerdo al *Lemma*4.1 la formulación variacional dual local del problema es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta u(x) - w(x) \cdot \nabla u(x) + f(x) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x; \cdot)) = \{\eta \in R : \eta \leq 0\} : \\ u(x) \in \partial\phi^*(x; \Delta u(x) - w(x) \cdot \nabla u(x) + f(x)) = \\ \left\{ \begin{array}{l} \{h(x)\}, \Delta u(x) - w(x) \cdot \nabla u(x) + f(x) < 0 \\ [h(x), +\infty), \Delta u(x) - w(x) \cdot \nabla u(x) + f(x) = 0, \\ x \in \Omega \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (4.23)$$

con:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial u}{\partial n}(x) &\in \mathfrak{D}(\psi^*(x; \cdot)) = R : \\ \gamma u(x) &\in \partial\psi^*(x; -\frac{\partial u}{\partial n}(x)) = \{\hat{u}(x)\}, \quad x \in \partial\Omega_D \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\partial u}{\partial n}(x) &\in \mathfrak{D}(\psi^*(x; \cdot)) = \{\hat{g}(x)\} : \\ \gamma u(x) &\in \partial\psi^*(x; -\frac{\partial u}{\partial n}(x)) = R, \quad x \in \partial\Omega_N \end{aligned} \quad (4.25)$$

De aqui, integrando por partes y utilizando la formula de Green las formulaciones variacionales primal y dual del problema son obtenidas de las desigualdades variacionales anteriores:

#### 4.6.3 Formulación variacional primal

$$FVP \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \in K \text{ tal que:} \\ \int_{\Omega} \nabla u \cdot (\nabla v - \nabla u) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla u (v - u) d\Omega \\ \geq \int_{\Omega} f(v - u) d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(\gamma v - \gamma u) d\partial\Omega, \quad \forall v \in K. \end{array} \right. \quad (4.26)$$

#### 4.6.4 Formulación variacional dual

$$FVD \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \in K^* \text{ tal que:} \\ \int_{\Omega} \nabla u \cdot (\nabla v - \nabla u) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla (v - u) d\Omega \geq \\ - \int_{\Omega} h(\Delta v - \Delta u) d\Omega + \int_{\Omega} h \mathbf{w} \cdot \nabla (v - u) d\Omega \\ + \int_{\partial\Omega_D} \hat{u} (\frac{\partial v}{\partial n} - \frac{\partial u}{\partial n}) d\partial\Omega, \quad \forall v \in K^*. \end{array} \right. \quad (4.27)$$

Donde  $K$  y  $K^*$  son los conjuntos de campos primales y duales admisibles:

$$K = \{v \in H^1(\Omega) : v \geq h \text{ en } \Omega, \quad \gamma v = \widehat{u} \text{ sobre } \partial\Omega_D\} \quad (4.28)$$

$$K^* = \left\{ \begin{array}{l} v \in H^1(\Omega) : \\ -\Delta \in L^2(\Omega), \quad \Delta u(x) - w(x) \cdot \nabla u(x) + f(x) \leq 0 \text{ en } \Omega, \\ -\frac{\partial v}{\partial n} = g \text{ sobre } \partial\Omega_N \end{array} \right\}, \quad (4.29)$$

con la regularidad fuerte de los datos:

$$(w, f, h, \widehat{u}, g) \in L^\infty(\Omega)^2 \times L^2(\Omega) \times H^2(\Omega) \times H^{\frac{3}{2}}(\partial\Omega_D) \times H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_N). \quad (4.30)$$

#### 4.6.5 Formulación variacional mixta

Introduciendo el campo dual sobre  $\partial\Omega_D$  :

$$s_n(x) = \frac{\partial u}{\partial n}(x), \quad x \in \partial\Omega_D \quad (4.31)$$

usando (4.23), (4.25) y (4.31) y aplicando la función de Green obtenemos la formulación variacional mixta siguiente:

$$FVM_1 \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (u, s_n) \in K_{\geq h} \times H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega_D) \text{ tal que :} \\ \int_{\Omega} \nabla u \cdot (\nabla v - \nabla u) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla u (v - u) d\Omega \\ \geq \int_{\Omega} f(v - u) d\Omega + \int_{\partial\Omega_D} s_n (\gamma v - \gamma u) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g (\gamma v - \gamma u) d\partial\Omega, \quad \forall v \in K_{\geq h}, \\ \int_{\partial\Omega_D} (\gamma u - \gamma \widehat{u}) (r_n - s_n) d\partial\Omega \geq 0, \quad \forall r_n \in H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega_D), \end{array} \right. \quad (4.32)$$

donde  $K_{\geq h} = \{v \in H^1(\Omega) : v \geq h \text{ en } \Omega\}$ . Introduciendo el campo dual  $\lambda^* = \Delta u(x) - w(x) \cdot \nabla u(x) + f(x)$ ,  $x \in \Omega$ , definido en (4.22), obtenemos la siguiente formulación variacional mixta dual:

$$FVM_2 \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (u, \lambda^*) \in K_{\widehat{u}} \times S_{\leq 0} : \\ \int_{\Omega} \nabla u \cdot (\nabla v - \nabla u) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla u (v - u) d\Omega \\ \geq \int_{\Omega} (f - \lambda^*) (v - u) d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g (\gamma v - \gamma u) d\partial\Omega, \quad \forall v \in K_{\widehat{u}}, \\ \int_{\Omega} (h - u) (\eta^* - \lambda^*) d\Omega \geq 0, \quad \forall \eta^* \in S_{\leq 0}. \end{array} \right. \quad (4.33)$$

Aquí  $K_{\hat{u}}$  es el conjunto de campos primales admisibles, que cumplen las condiciones de frontera Dirichlet. Y  $S_{\leq 0}$  es el conjunto de campos duales admisibles, es decir:

$$K_{\hat{u}} = \{v \in H^1(\Omega) : \gamma v = \hat{u}, \quad \text{sobre } \partial\Omega_D\} \quad (4.34)$$

$$y$$

$$S_{\leq 0} = \{\eta^* \in L^2(\Omega) : \eta^* \leq 0, \quad \text{en } \Omega\}. \quad (4.35)$$

*Nota 4.1* Haciendo  $v = u \pm v_0 \in K_{\hat{u}}$ ,  $\forall v_0 \in K_0$  y  $v_0 = v - u \in K_0$ ,  $\forall v \in K_{\hat{u}}$ , entonces la primer desigualdad variacional en (4.33) es equivalente a la ecuación variacional:

$$\begin{cases} u \in K_{\hat{u}} : \\ \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v_0 d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla u v_0 d\Omega = \int_{\Omega} (f - \lambda^*) v_0 d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g \gamma v_0 d\partial\Omega, \end{cases} \quad \forall v_0 \in K_0 \quad (4.36)$$

En las ecuaciones (4.33) y (4.36) hemos supuesto que la función de control  $\lambda^*$  es conocida y es tomada en cuenta en la ecuación (4.22) como una restricción u obstáculo interior y tiene la siguiente interpretación:

$$\lambda^* = \text{Pr } ojs_{S_{\leq 0}}(\lambda^* - \rho(h - u)). \quad (4.37)$$

donde  $\rho > 0$  es un parámetro fijo y  $\text{Pr } ojs_{S_{\leq 0}}$  es el operador proyección de  $L^2(\Omega)$  en el subconjunto convexo  $S_{\leq 0}$ , y es la base para derivar algoritmos de Uzawa en la solución de los problemas discretos asociados. [20], [21].

## Capítulo 5

# MODELO ESTACIONARIO DE DIFUSIÓN ADVECCIÓN CON CONTROL DE CONTAMINANTES EN UN FLUIDO EN MEDIOS POROSOS

En esta sección aplicaremos el método estudiado en el capítulo anterior al problema de control de contaminantes en un fluido en medios porosos. Estableceremos dos tipos de restricciones o controles, el control en el interior del dominio  $\Omega$  y el control en la frontera  $\partial\Omega_C$ . El método consiste en modelar los mecanismos de control internos y en la frontera en términos de ecuaciones subdiferenciales primales locales, a los que corresponden desigualdades variacionales locales. Se realiza la dualización de los controles mediante la gráfica inversa de los subdiferenciales. Mediante la integración por partes y aplicando la función de Green a una combinación de la formulación primal y dual obtenemos la formulación variacional global del problema.

Una vez con la formulación variacional del problema, obtendremos la aproximación de elemento finito. Y la solución numérica usando algoritmos iterativos del tipo Uzawa.

### 5.1 Formulaciones Variacionales Locales del Problema de Control

En esta sección presentaremos las formulaciones variacionales del problema de control de contaminantes en acuíferos los cuales están asociados con la ecuación de difusión advección estacionaria:

$$- \operatorname{div}(\mathbf{D} \operatorname{grad} u) + \mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u + qu = f, \quad \text{en } \Omega \quad (5.1)$$

donde  $\Omega \subset R^n$ ,  $n = 1, 2, 3$ ;  $u$  es la concentración del contaminante,  $\mathbf{D}$  es el tensor de difusión dispersión, el cual es simétrico y uniformemente positivo definido, cuya norma  $\|\mathbf{D} \operatorname{grad} u\|_{W^\infty}$  tiende a cero cuando la advección es dominante,  $f$  son las fuentes de contaminantes,  $\mathbf{w}$  el campo de velocidades,  $qu$  son fuentes o sumideros del fluido con contaminante, las cuales nos pueden servir como medios de control, estamos suponiendo que el fluido es incompresible.

Tomaremos las siguientes restricciones:

1°.- Queremos que la concentración de contaminantes, para cada punto en el acuífero, este comprendida entre dos valores,  $c_1$  y  $c_2$ , es decir:  $0 \leq c_1 < u(x) \leq c_2$ ,  $x \in \Omega$ .

2.-Que la concentración, o el flujo de contaminantes este en un rango prefijado en una parte de la frontera, es decir control en la frontera.

### 5.1.1 Formulación variacional primal

Siguiendo con el método de los subdiferenciales locales, estudiado en la sección anterior, un problema general de control, que satisface las restricciones impuestas, con un mecanismo de control, desconocido a priori, puede ser expresado en términos de una ecuación subdiferencial primal:

$$\begin{aligned} u(x) \in \mathfrak{D}(\phi(x, \cdot)) : \\ \operatorname{div}(\mathbf{D}(x)\operatorname{gradu}(x)) - \mathbf{w}(x) \cdot \operatorname{gradu}(x) + f(x) \in \partial\phi(x, u(x)), \quad x \in \Omega, \end{aligned} \quad (5.2)$$

donde  $\mathfrak{D}(\phi(x, \cdot)) \subset R$  es el conjunto de campos primales admisibles para cada  $x \in \Omega$ , que satisfacen las restricciones de control y  $\partial\phi(x, u(x)) : R \rightarrow 2^R$  es un subdiferencial monótono que modela un mecanismo o acción de control interior, cuyos subgradientes  $p^*(x) \in \partial\phi(x, u(x))$  son fuentes de control, desconocidas a priori, tal que:

$$-\operatorname{div}(\mathbf{D}(x)\operatorname{gradu}(x)) + \mathbf{w}(x) \cdot \operatorname{gradu}(x) = f(x) - p^*(x) \quad x \in \Omega, \quad (5.3)$$

o lo que es lo mismo:

$$p^*(x) = \operatorname{div}(\mathbf{D}(x)\operatorname{gradu}(x)) - \mathbf{w}(x) \cdot \operatorname{gradu}(x) + f(x) \quad (5.4)$$

De la definición de subdiferencial tenemos:

$$\partial\phi(x, u(x)) = \{q^* \in R : \phi(x, \xi) \geq \phi(x, u(x)) + q^*(\xi - u(x)), \quad \forall \xi \in \mathfrak{D}(\phi(x, \cdot))\} \quad (5.5)$$

donde  $\phi(x, \cdot) : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  es el superpotencial convexo con dominio efectivo  $\mathfrak{D}(\phi(x, \cdot)) = \{\xi \in R : \phi(x, \xi) < +\infty\}$ . Entonces el problema (5.2) es caracterizado por la desigualdad variacional:

$$\begin{aligned}
 & u(x) \in \mathfrak{D}(\phi(x, \cdot)) : \\
 & \left\{ -\varepsilon \operatorname{div}(\underset{\sim}{D}(x) \operatorname{gradu}(x)) + \mathbf{w}(x) \cdot \operatorname{gradu}(x) \right\} \{v(x) - u(x)\} + \phi(x, v(x)) - \phi(x, u(x)) \\
 & \geq f(x) \{v(x) - u(x)\}, \quad \forall v(x) \in \mathfrak{D}(\phi(x, \cdot)), \quad x \in \Omega,
 \end{aligned}
 \tag{5.6}$$

**Control en el interior**

Consideremos una restricción típica de control, que la concentración de contaminantes, para cada punto en el acuífero, este comprendida entre dos valores,  $c_1$  y  $c_2$ , es decir:  $0 \leq c_1 < u(x) \leq c_2$ ,  $x \in \Omega$ , entonces:

$$u(x) \in \mathfrak{D}(\phi(x, \cdot)) = \{ \xi \in R : c_1(x) < u(x) \leq c_2(x) \}, \quad x \in \Omega, \tag{5.7}$$

entonces el superpotencial asociado a estas restricciones es la función indicatriz del conjunto convexo  $[c_1(x), c_2(x)]$  (Fig.5.1):

$$\phi(x, u(x)) = I_{[c_1(x), c_2(x)]} \equiv \begin{cases} 0, & c_1(x) \leq u(x) \leq c_2(x) \\ +\infty & \text{en otro caso.} \end{cases} \tag{5.8}$$

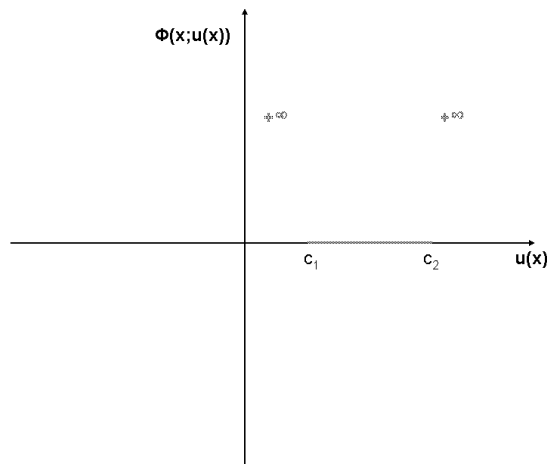


Fig.5.1.- Superpotencial que modela las restricciones

El mecanismo de control es modelado por el subdiferencial dado por (Fig.5.2):

$$p^*(x) \in \partial\phi(x, u(x)) = \begin{cases} (-\infty, 0], & u(x) = c_1(x), \\ \{0\}, & c_1(x) < u(x) \leq c_2(x), \\ [0, +\infty), & u(x) = c_2(x), \\ \emptyset, & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (5.9)$$

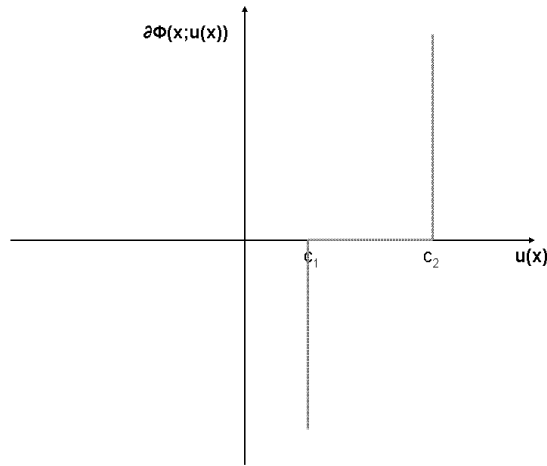


Fig.5.2.- Subdiferencial de control en el interior

En la referencia [18] podemos encontrar otras restricciones y mecanismos de control identificados con gráficas monótonas maximales.

### Control en la frontera

Consideraremos ahora las condiciones de frontera y las restricciones de control en la frontera. En forma general ellas son expresadas como:

$$\gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi(x, \cdot)) : -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) \in \partial\psi(x, \gamma u(x)), \quad x \in \partial\Omega, \quad (5.10)$$

donde  $\gamma u$  es la traza, el valor Dirichlet, del campo primal  $u$  en la frontera,  $\partial\Omega$ , del dominio  $\Omega$ ,  $\mathfrak{D}(\psi(x, \cdot)) \subset R$  es el conjunto de trazas admisibles y  $\partial\psi(x, \gamma u(x)) : R \rightarrow 2^R$  es el subdiferencial monótono que modela un mecanismo de control de frontera, cuyos subgradientes:

$$-\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) = -\mathbf{D}(x) \text{grad}u(x) \cdot \mathbf{n}(x), \quad (5.11)$$



corresponden a los posibles valores del flujo normal, los valores Newman, de  $u$  a través de la frontera  $\partial\Omega$ . Siguiendo el método de subdiferenciales el problema (5.10) es caracterizado en términos del superpotencial  $\psi(x, \cdot) : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  como:

$$\gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi(x, \cdot)) :$$

$$\psi(x, \gamma v(x)) - \psi(x, \gamma u(x)) \geq -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) \{\gamma v(x) - \gamma u(x)\}, \quad \forall \gamma v(x) \in \mathfrak{D}(\psi(x, \cdot)), \quad x \in \partial\Omega. \quad (5.12)$$

### Condiciones de frontera Dirichlet

Si, en particular, suponemos condiciones de frontera Dirichlet  $\hat{u}$  prescritas en una parte de la frontera  $\partial\Omega_D$  entonces :

$$\gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi_D(x, \cdot)) = \{\hat{u}\} : -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) \in \partial\psi_D(x, \gamma u(x)) = R, \quad x \in \partial\Omega_D, \quad (5.13)$$

lo que nos conduce a la desigualdad variacional correspondiente:

$$\gamma u(x) \in \{\hat{u}\} : 0 \geq -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) \{\gamma v(x) - \gamma u(x)\}, \quad \forall \gamma v(x) \in \{\hat{u}\}, \quad x \in \partial\Omega_D. \quad (5.14)$$

### Condiciones de frontera Newman

Si una condición de frontera Newman,  $g$ , es prescrita en otra parte de la frontera,  $\partial\Omega_N$ , tenemos:

$$\gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi_N(x, \cdot)) = R : -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) \in \partial\psi_N(x, \gamma u(x)) = \{g\}, \quad x \in \partial\Omega_N, \quad (5.15)$$

que nos conduce a la desigualdad variacional:

$$\gamma u(x) \in R : g(x) \{\gamma v(x) - \gamma u(x)\} \geq -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) \{\gamma v(x) - \gamma u(x)\} \quad \forall \gamma v(x) \in R, \quad x \in \partial\Omega_N. \quad (5.16)$$

Notemos que en (5.15) el flujo normal a la frontera  $-\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) \in R$  y en (5.13) la traza  $\gamma u(x) \in R$  aparecen respectivamente como condiciones de frontera complementarias y son a priori desconocidas. También los superpotenciales Dirichlet  $\psi_D(x, \cdot) = I_{\{\hat{u}(x)\}}$ , es la función indicatriz del conjunto convexo  $\{\hat{u}(x)\}$  y Newman  $\psi_N(x, \cdot) = g(x)(\cdot)$ , la función lineal con pendiente  $g(x)$ . Entonces las desigualdades variacionales toman la forma (5.14) y (5.16).

### Condiciones en la frontera de control

En el resto de la frontera  $\partial\Omega_C = \partial\Omega \setminus (\partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N)$ , supondremos que es impuesta una restricción de control general, es decir:

$$\gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi_C(x, \cdot)) : -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) \in \partial\psi_C(x, \gamma u(x)), \quad x \in \partial\Omega_C. \quad (5.17)$$

cuya desigualdad variacional es:

$$\gamma u(x) \in \mathfrak{D}(\psi_C(x, \cdot)) :$$

$$\psi_C(x, \gamma v(x)) - \psi_C(x, \gamma u(x)) \geq -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) \{\gamma v(x) - \gamma u(x)\}, \quad \forall \gamma v(x) \in \mathfrak{D}(\psi_C(x, \cdot)), \quad x \in \partial\Omega_C. \quad (5.18)$$

### Formulaciones Subdiferenciales Duales

Siguiendo con el método de subdiferenciales, hacemos la dualización de las restricciones de control mediante la gráfica inversa de sus subdiferenciales. Es decir para el superpotencial  $f : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$ , una función propia, convexa y semicontinua, con subdiferencial  $\partial f : R \rightarrow 2^R$ . Aplicamos la equivalencia (*Lemma 4.1*):

$$q \in \mathfrak{D}(f) : q^* \in \partial f(q) \Leftrightarrow q^* \in \mathfrak{D}(f^*) : q \in \partial f^*(q^*) \quad (5.19)$$

donde  $\partial f^* : R \rightarrow 2^R$  es el subdiferencial monótono de  $f^*$ , la función conjugada de  $f$ .

Entonces, utilizando la definición de  $p^*$ , la función fuente de control dual, la formulación subdiferencial dual del problema primal esta dada por:

$$p^*(x) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, \cdot)) : u(x) \in \partial\phi^*(x; p^*(x)), \quad x \in \Omega, \quad (5.20)$$

donde  $\partial\phi^*(x; \cdot) : R \rightarrow 2^R$  es el subdiferencial de la función cojugada de  $\phi(x, \cdot)$ ,  $\phi^*(x, \cdot) : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$ . Como antes, de la definición de subdiferencial y de la parte derecha de (5.19), obtenemos la desigualdad variacional dual:

$$p^*(x) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, \cdot)) : \tag{5.21}$$

$$\phi^*(x; q^*(x)) - \phi^*(x; p^*(x)) \geq u(x)(q^*(x) - p^*(x)), \quad \forall q^*(x) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, \cdot)), \quad x \in \Omega.$$

En el ejemplo (5.7) - (5.9), la formulación dual toma la forma (Fig. 5.2):

$$p^*(x) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, \cdot)) = R : \tag{5.22}$$

$$u(x) \in \partial\phi^*(x; p^*(x)) = \begin{cases} \{c_1(x)\}, & p^*(x) < 0 \\ [c_1(x), c_2(x)], & p^*(x) = 0 \\ \{c_2(x)\}, & p^*(x) > 0. \end{cases}$$

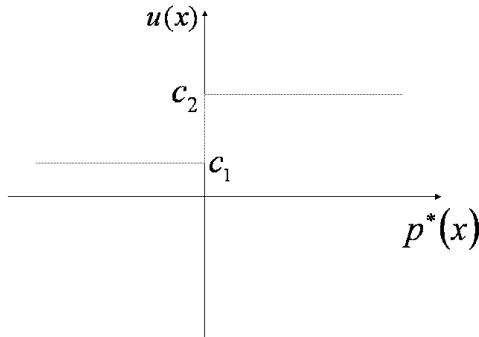


Fig.5.2.- Subdiferencial dual.

con superpotencial dual:

$$\phi^*(x; p^*(x)) = \begin{cases} c_1(x)p^*(x), & p^*(x) \leq 0 \\ c_2(x)p^*(x), & p^*(x) \geq 0 \end{cases} \tag{5.23}$$

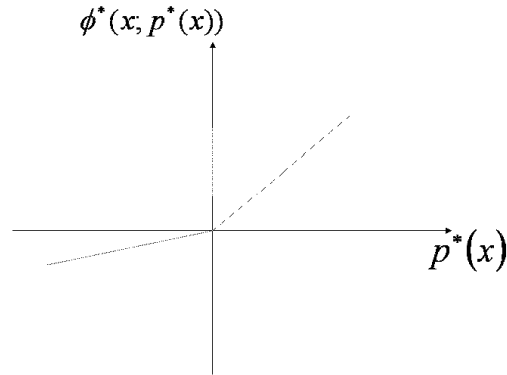


Fig.5.3.- Superpotencial dual.

Enseguida introducimos el flujo normal como la función de control de frontera:

$$s^*(x) = -\frac{\partial u}{\partial \nu}(x), \quad x \in \partial\Omega_C, \quad (5.24)$$

y denotamos por  $\partial\psi_c^*(x; \cdot) : R \rightarrow 2^R$ , el subdiferencial de la función conjugada de  $\psi_c(x; \cdot)$ ,  $\psi_c^*(x, \cdot) : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$ . La ecuación subdiferencial asociada es:

$$s^*(x) \in \mathfrak{D}(\psi_c^*(x; \cdot)) : \gamma u(x) \in \partial\psi_c^*(x; s^*(x)), \quad x \in \partial\Omega_C, \quad (5.25)$$

cuya desigualdad variacional es:

$$s^*(x) \in \mathfrak{D}(\psi_c^*(x; \cdot)) :$$

$$\psi_c^*(x, r^*(x)) - \psi_c^*(x, s^*(x)) \geq \gamma u(x) \{r^*(x) - s^*(x)\}, \quad \forall r^*(x) \in \mathfrak{D}(\psi_c^*(x, \cdot)), \quad x \in \partial\Omega_C. \quad (5.26)$$

## 5.2 Formulaciones Variacionales Globales Primal y Mixta

Para construir las formulaciones variacionales globales primal y mixta, de los problemas de control interno y en la frontera, continuamos aplicando la metodología antes mencionada.

### 5.2.1 Formulación variacional primal

Para la formulación variacional global en los espacios de Sobolev requerimos la siguiente regularidad fuerte para los datos:

$$(\mathbf{D}, \mathbf{w}, f, \hat{u}, g) \in \mathbf{W}^{1,\infty}(\Omega) \times \mathbf{L}^\infty(\Omega) \times L^2(\Omega) \times H^{\frac{3}{2}}(\partial\Omega_D) \times H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_N). \quad (5.27)$$

La formulación variacional primal de el problema sigue de las desigualdades variacionales (5.6), (5.12), (5.18), (5.14), (5.16) y (5.17). Integrando y aplicando la formula de Green:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \in K \text{ tal que:} \\ \int_{\Omega} \mathbf{D} \nabla u \cdot (\nabla v - \nabla u) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla u (v - u) d\Omega + \int_{\Omega} \phi(x; v) d\Omega - \int_{\Omega} \phi(x; u) d\Omega \\ + \int_{\partial\Omega_c} \psi_c(x; \gamma v) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_c} \psi_c(x; \gamma u) d\partial\Omega \geq \int_{\Omega} f(v - u) d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(\gamma v - \gamma u) d\partial\Omega, \\ \forall v \in K, \end{array} \right. \quad (5.28)$$

donde  $K$  es la familia de campos primales admisibles, los cuales satisfacen las restricciones de control internas y de frontera y las condiciones de frontera Dirichlet, es decir:

$$K = \left\{ \begin{array}{ll} v \in H^1(\Omega) : v(x) \in \mathcal{D}(\phi(x, \cdot)), & x \in \Omega, \\ \gamma v(x) \in \mathcal{D}\psi_c(x, \cdot), & x \in \partial\Omega_C, \\ \gamma v(x) = \hat{u}(x), & x \in \partial\Omega_D \end{array} \right\} \quad (5.29)$$

Para garantizar la existencia y unicidad de la solución del problema primal (5.28), (ver referencias [18], [20]), junto con la regularidad de los datos, suponemos que el campo de velocidades  $\mathbf{w}$  satisface la condición de compatibilidad en la frontera Newman:

$$\mathbf{w}(x) \cdot \mathbf{n} \geq 0, \quad x \in \partial\Omega_N \quad (5.30)$$

Esto es, la frontera Newman es una frontera de flujo saliente. Entonces la forma bilineal no simétrica del problema es  $K$  – *coerciva*.

## 5.2.2 Formulación Variacional Mixta

Procediendo como arriba, de las desigualdades variacionales locales duales (5.21), (5.26) y las primales (5.14) y (5.16), obtenemos la siguiente formulación variacional mixta global del problema con restricciones de control dualizadas:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (u, p^*, s^*) \in K_{\hat{u}} \times C_I \times C_B \text{ tal que:} \\ \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla u \cdot (\nabla v - \nabla u) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla u (v - u) d\Omega \\ \geq \int_{\Omega} (f - p^*) (v - u) d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(\gamma v - \gamma u) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} s^*(\gamma v - \gamma u) d\partial\Omega, \quad \forall v \in K_{\hat{u}} \\ \int_{\Omega} \phi^*(x; q^*) d\Omega - \int_{\Omega} \phi^*(x; p^*) d\Omega \geq \int_{\Omega} u(x)(q^* - p^*) d\Omega, \quad \forall q^* \in C_I, \\ \int_{\partial\Omega_C} \psi_C^*(x, r^*) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} \psi_C^*(x, s^*) d\partial\Omega \geq \int_{\partial\Omega_C} \gamma u \{r^* - s^*\} d\partial\Omega, \quad \forall r^* \in C_B \end{array} \right. \quad (5.31)$$

donde los conjuntos de campos admisibles primales y duales están definidos respectivamente por:

$$\begin{aligned} K_{\hat{u}} &= \{v \in H^1(\Omega) : \gamma v(x) = \hat{u}(x), \quad x \in \partial\Omega_D\} \\ &\quad y \\ C_I &= \{q^* \in L^2(\Omega) : q^*(x) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, \cdot)), \quad x \in \Omega\} \\ C_B &= \{r^* \in L^2(\partial\Omega_C) : r^*(x) \in \mathfrak{D}(\psi_C^*(x, \cdot)), \quad x \in \partial\Omega_C\}. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Es importante notar que por virtud de la estructura del campo primal  $K_{\hat{u}}$ ,  $v = u \pm v_0 \in K_{\hat{u}}$ ,  $\forall v_0 \in K_0$ , y viceversa,  $v_0 = v - u \in K_0$ ,  $\forall v \in K_{\hat{u}}$ . Entonces la desigualdad variacional primal en (3.74) es equivalente a la igualdad variacional estandard:

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla u \cdot \nabla v_0 d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla u v_0 d\Omega \\ &= \int_{\Omega} (f - p^*) v_0 d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g \gamma v_0 d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} s^* \gamma v_0 d\partial\Omega, \quad \forall v_0 \in K_0. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Concluimos esta sección observando que el proceso de dualización de las restricciones de control interno y de frontera ha partido el problema no lineal original, en tres problemas acoplados, un problema primal lineal y dos problemas duales no lineales simples. Esta estructura separada es de interés para construir esquemas de elemento finito mixto.

### 5.3 Aproximaciones de Elemento Finito

Sobre la base de las formulaciones variacionales realizadas en el párrafo anterior construiremos aproximaciones de elemento finito primal y mixta del problema de difusión advección.

#### 5.3.1 Aproximaciones de Elemento Finito Estandar

Introducimos las aproximaciones internas abstractas de los problemas variacionales (5.28), (5.31) y (5.33) [16], [20] y [21]. Sean  $V_h \subset H^1(\Omega)$ ,  $U_h \subset L^2(\Omega)$  y  $W_h \subset L^2(\partial\Omega_C)$  tres familias de aproximaciones internas, con parámetro  $h > 0$ , y dimensiones  $m_h$ ,  $r_h$  y  $s_h \rightarrow \infty$  cuando  $h \rightarrow 0$ . Sean  $K_h \subset V_h$ ,  $K_{\hat{u},h} \subset V_h$ ,  $C_{I,h} \subset U_h$  y  $C_{B,h} \subset W_h$  las cuatro familias correspondientes de subconjuntos convexos, aproximaciones de los subconjuntos convexos de campos primales admisibles  $K \subset H^1(\Omega)$ ,  $K_{\hat{u}} \subset H^1(\Omega)$  y campos duales admisibles  $C_I \subset L^2(\Omega)$  y  $C_B \subset L^2(\partial\Omega_C)$  definidos en (5.32).

Entonces asociamos al problema primal, la aproximación interna de elemento finito:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u_h \in K_h \text{ tal que:} \\ \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla u_h \cdot (\nabla v_h - \nabla u_h) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla u_h (v_h - u_h) d\Omega + \int_{\Omega} \phi(x; v_h) d\Omega - \int_{\Omega} \phi(x; u_h) d\Omega \\ + \int_{\partial\Omega_e} \psi_c(x; \gamma v_h) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_e} \psi_c(x; \gamma u_h) d\partial\Omega \\ \geq \int_{\Omega} f(v_h - u_h) d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(\gamma v_h - \gamma u_h) d\partial\Omega, \quad \forall v_h \in K_h, \end{array} \right. \quad (5.34)$$

De la misma manera asociamos al problema mixto la aproximación interna de elemento finito:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (u_h, p_h^*, s_h^*) \in K_{\hat{u},h} \times C_{I,h} \times C_{B,h} \text{ tal que:} \\ \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla u_h \cdot \nabla v_{0,h} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla u_h v_{0,h} d\Omega \\ = \int_{\Omega} (f - p_h^*) v_{0,h} d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g \gamma v_{0,h} d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} s_h^* \gamma v_{0,h} d\partial\Omega, \quad \forall v_{0,h} \in K_{0,h}. \\ \int_{\Omega} \phi^*(x; q_h^*) d\Omega - \int_{\Omega} \phi^*(x; p_h^*) d\Omega \geq \int_{\Omega} u_h (q_h^* - p_h^*) d\Omega, \quad \forall q_h^* \in C_{I,h}, \\ \int_{\partial\Omega_C} \psi_C^*(x, r_h^*) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} \psi_C^*(x, s_h^*) d\partial\Omega \geq \int_{\partial\Omega_C} \gamma u \{r_h^* - s_h^*\} d\partial\Omega, \quad \forall r_h^* \in C_{B,h}. \end{array} \right. \quad (5.35)$$

Ahora identificamos los subespacios de dimensión finita de la aproximación interna con los subespacios de elemento finito. Sean  $V_h$ ,  $U_h$  y  $W_h$ , generados por las funciones base globales de elemento finito conforme, [23], [24], es decir:

$$\begin{aligned} V_h &= \text{span} \{ \zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, \dots, \zeta_{m_h} \} \subset H^1(\Omega), \\ U_h &= \text{span} \{ \xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_{r_h} \} \subset L^2(\Omega), \\ W_h &= \text{span} \{ \chi_1, \chi_2, \chi_3, \dots, \chi_{s_h} \} \subset L^2(\partial\Omega_C). \end{aligned} \quad (5.36)$$

Introduciendo los vectores coordenadas relativos a las bases (5.36):  $\boldsymbol{\alpha} \in R^{m_h}$ ,  $\boldsymbol{\lambda}^* \in R^{r_h}$  y  $\boldsymbol{\mu}^* \in R^{s_h}$  de  $u_h \in K_{\hat{u},h}$ ,  $p_h^* \in C_{I,h}$  y  $s_h^* \in C_{B,h}$ . Entonces la versión estandard de elemento finito de los problemas discretos primal (5.34) dada por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } \boldsymbol{\alpha} \in K^{m_h} \text{ tal que:} \\ \{\mathbf{A} + \mathbf{B}\} \boldsymbol{\alpha} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}\} + \phi(\boldsymbol{\beta}) - \phi(\boldsymbol{\alpha}) + \psi_C(\boldsymbol{\beta}) - \psi_C(\boldsymbol{\alpha}) \geq \{f - \mathbf{g}\} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}\}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K^{m_h} \end{array} \right. \quad (5.37)$$

y mixto (5.35) dada por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \in K_{\hat{u}}^{m_h} \times C_I^{r_h} \times C_B^{s_h} \text{ tal que:} \\ \{\mathbf{A} + \mathbf{B}\} \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\beta} = \{f - \mathbf{g} - \mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}^* - \mathbf{D}^T \boldsymbol{\mu}^*\} \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K_0^{m_h}, \\ \phi^*(\boldsymbol{\eta}^*) - \phi^*(\boldsymbol{\lambda}^*) \geq \mathbf{C} \boldsymbol{\alpha} \cdot \{\boldsymbol{\eta}^* - \boldsymbol{\lambda}^*\}, \quad \forall \boldsymbol{\eta}^* \in C_I^{r_h}, \\ \psi_C(\boldsymbol{\nu}^*) - \psi_C(\boldsymbol{\mu}^*) \geq \mathbf{D} \boldsymbol{\alpha} \cdot \{\boldsymbol{\nu}^* - \boldsymbol{\mu}^*\}, \quad \forall \boldsymbol{\nu}^* \in C_B^{s_h}. \end{array} \right. \quad (5.38)$$

Aqui  $K^{m_h}$ ,  $K_{\hat{u}}^{m_h}$ ,  $K_0^{m_h}$ ,  $C_I^{r_h}$  y  $C_B^{s_h}$  son las versiones coordenadas de  $K_h$ ,  $K_{\hat{u},h}$ ,  $K_{0,h}$ ,  $C_{I,h}$  y  $C_{B,h}$  respectivamente y las funcionales, vectores y matrices están definidas para:  $i, j = 1, 2, \dots, m_h$ ;  $r = 1, 2, \dots, r_h$  y  $s = 1, 2, \dots, s_h$ , como:

$$A_{ij} = \int_{\Omega} \mathbf{D} \nabla \zeta_j \cdot \nabla \zeta_i d\Omega,$$

$$B_{ij} = \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla \zeta_j \zeta_i d\partial\Omega,$$



$$\begin{aligned}
\phi(\beta) &= \int_{\Omega} \phi(x; \sum_{i=1}^{m_h} \beta_i \zeta_i) d\Omega, \\
\psi_c(\beta) &= \int_{\partial\Omega_C} \psi_c(x; \sum_{i=1}^{m_h} \beta_i \gamma \zeta_i) d\partial\Omega, \\
f_i &= \int_{\Omega} f \zeta_i d\Omega, \\
g_i &= \int_{\partial\Omega_N} g \gamma \zeta_i d\partial\Omega, \\
\phi^*(\eta^*) &= \int_{\Omega} \phi^*(x; \sum_{r=1}^{r_h} \eta_r^* \xi_r) d\Omega, \\
C_{ri} &= \int_{\Omega} \zeta_i \xi_r d\Omega, \\
\psi_C(\nu^*) &= \int_{\Omega} \psi_C^*(x; \sum_{s=1}^{s_h} \nu_s^* \chi_s) d\Omega, \\
D_{si} &= \int_{\Omega} \zeta_i \chi_s d\Omega.
\end{aligned} \tag{5.39}$$

En un caso particular podemos considerar que el dominio  $\Omega \subset R^n$  puede ser descompuesto en  $N$  elementos simples:

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{r=1}^N E_r, \quad \overset{\circ}{E}_r \cap \overset{\circ}{E}_s = \emptyset \text{ si } r \neq s, \tag{5.40}$$

donde  $\overset{\circ}{E}_r$  es el interior de del  $r'$ ésimo elemento finito  $E_r$ . Definimos las funciones base  $\{\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, \dots, \zeta_{m_h}\} \subset V_h$ ,  $\{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_{r_h}\} \subset U_h$ ,  $\{\chi_1, \chi_2, \chi_3, \dots, \chi_{s_h}\} \subset W_h$  como la interpolación global Lagrangiana de funciones de elemento finito de tipo (1) y tipo (0), caracterizadas como sigue:

$$\begin{aligned}
V_h &= \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}) : v_h|_{E_r} \in P_{\leq 1}(E_r), \quad r = 1, 2, \dots, N\} \subset H^1(\Omega) \\
U_h &= \{r_h^* \in L^2(\Omega) : r_h^*|_{E_r} \in P_{=0}(E_r), \quad r = 1, 2, \dots, N\} \\
W_h &= \{q_h^* \in L^2(\partial\Omega_C) : q_h^*|_{\partial E_r \cap \partial\Omega_C} \in P_{=0}(\partial E_r \cap \partial\Omega_C), \quad r = 1, 2, \dots, N\}
\end{aligned} \tag{5.41}$$

Esto es las funciones de  $V_h$  son globalmente continuas y lineales por partes, mientras que las de  $U_h$  y  $W_h$  son discontinuas y constantes por partes.

## 5.4 Algoritmos de Resolución Tipo Uzawa

En esta sección establecemos los algoritmos de solución de tipo Uzawa para los esquemas de elemento finito vistos en la sección 3.1. Estos algoritmos siguen de las desigualdades en (5.37) y (5.38), en términos de problemas de optimización asociados a gráficas de proximidad. Los teoremas de convergencia serán establecidos por su relación con problemas de punto fijo de operadores resolventes, identificándolos con los algoritmos *ALG 0* y *ALG 4* de Gabay [27].

### 5.4.1 Algoritmos del tipo Uzawa

Sea  $Y$  un espacio de Hilbert. Una gráfica de proximidad  $\text{Pr } ox_\Lambda : Y \rightarrow \mathfrak{D}(\Lambda) \subset Y$ , relativa a un funcional propio inferiormente convexo semicontinuo,  $\Lambda : Y \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ , es definida, [28], como :

$$z \rightarrow x = \text{Pr } ox_\Lambda(z) \equiv \arg\left(\inf_{y \in \mathfrak{D}(\Lambda)} \left\{ \frac{1}{2} \|y - z\|_Y^2 + \Lambda(y) \right\}\right) \quad (5.42)$$

con el correspondiente problema de Euler Lagrange:

$$\begin{cases} \text{Encontrar } x \in \mathfrak{D}(\Lambda) \text{ tal que :} \\ (x - z, y - x)_Y + \Lambda(y) - \Lambda(x) \geq 0, \quad \forall y \in \mathfrak{D}(\Lambda) \end{cases} \quad (5.43)$$

En nuestro caso  $\Lambda$  es la función indicatriz del conjunto cerrado convexo  $\mathfrak{C}$ , la gráfica proximal corresponde a la proyección de  $Y$  hacia  $\mathfrak{C}$  :  $\text{Pr } oy_{\mathfrak{C}} : Y \rightarrow \mathfrak{C} \subset Y$ .

Entonces, multiplicando las desigualdades en (5.42) y (5.43) por un parámetro fijo arbitrario  $\rho > 0$ , de acuerdo con (5.45) y (5.46) obtenemos los siguiente proximales [29] y [30]:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha} &= \text{Pr } ox_{\rho(\phi + \psi_c + I_{K^m_h})}(\boldsymbol{\alpha} - \rho(\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{B}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{f} + \mathbf{g})), \\ \boldsymbol{\lambda}^* &= \text{Pr } ox_{\rho\phi^*}(\boldsymbol{\lambda}^* + \rho\mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}), \\ \boldsymbol{\mu}^* &= \text{Pr } ox_{\rho\psi_c^*}(\boldsymbol{\mu}^* + \rho\mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}). \end{aligned} \quad (5.44)$$

De (5.37) y (5.38) obtenemos los siguientes algoritmos iterativos del tipo Uzawa, donde el parámetro  $\rho > 0$  es escogido mediante criterios de convergencia:

*Algoritmo ALG0:*

Dado  $\boldsymbol{\alpha}^0 \in K^{m_h}$ , y conocido  $\boldsymbol{\alpha}^l \in K^{m_h}$ , calcular  $\boldsymbol{\alpha}^{l+1} \in K^{m_h}$  tal que : (5.45)

$$\boldsymbol{\alpha}^{l+1} = \text{Pr ox}_{\rho(\phi+\psi_c+I_{K^{m_h}})}(\boldsymbol{\alpha}^l - \rho(\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}^l + \mathbf{B}\boldsymbol{\alpha}^l - \mathbf{f} + \mathbf{g}))$$

*Algoritmo ALG4 :*

Dados  $(\lambda_0^*, \mu_0^*) \in C_I^{r_h} \times C_B^{s_h}$ , y conocidos  $(\lambda_l^*, \mu_l^*) \in C_I^{r_h} \times C_B^{s_h}$ ,  $l \geq 0$ ,

calcular  $\boldsymbol{\alpha}^l \in K_{\hat{u}}^{m_h}$  y  $(\lambda_{l+1}^*, \mu_{l+1}^*) \in C_I^{r_h} \times C_B^{s_h}$  tal que :

$$\{\mathbf{A} + \mathbf{B}\} \boldsymbol{\alpha}^l \cdot \boldsymbol{\beta} = \{f - \mathbf{g} - \mathbf{C}^T \lambda_l^* - D^T \mu_l^*\} \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K_0^{m_h} \quad (5.46)$$

$$\lambda_{l+1}^* = \text{Pr ox}_{\rho\phi^*}(\lambda_l^* + \rho\mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}^l),$$

$$\mu_{l+1}^* = \text{Pr ox}_{\rho\psi_c^*}(\mu_l^* + \rho\mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}^l).$$

## Capítulo 6

# MODELO EVOLUTIVO DE DIFUSIÓN ADVECCIÓN CON CONTROL DE CONTAMINANTES EN UN FLUIDO EN MEDIOS POROSOS

En este capítulo, para el problema evolutivo de control de difusión y advección de contaminantes en un fluido en medios porosos, el cual es no lineal y no potencial, seguiremos con la misma metodología, vista en el capítulo anterior, para construir los modelos de control y sus correspondientes formulaciones variacionales, así como las aproximaciones de elemento finito y los algoritmos de resolución numérica.

En primer lugar modelaremos los mecanismos de control en el interior y en la frontera mediante ecuaciones subdiferenciales locales, procediendo a construir las formulaciones variacionales, pseudoinstantáneas, globales primal y mixta, la última con restricciones de control dualizadas, las cuales serán la base del análisis y los esquemas numéricos.

Enseguida introducimos la aproximación abstracta interna semidiscreta para construir los modelos de elemento finito.

En relación con la discretización en el tiempo, aplicamos el esquema semi-implícito de Euler al modelo primal de transporte y el esquema  $\theta$  de punto medio al modelo mixto. El esquema semi-implícito es identificado con un algoritmo de proximidad y en el caso de que los datos y el control sean independientes del tiempo corresponde a un algoritmo primal tipo Uzawa *ALG0*, como en el caso del problema estacionario de control visto en el capítulo anterior. Un algoritmo de resolución tipo Uzawa es formulado para el esquema  $\theta$  de punto medio mixto, via operadores de proximidad, correspondiendo al algoritmo mixto de tipo Uzawa *ALG4*.

### **6.1 Formulaciones subdiferenciales locales del problema evolutivo con control**

En esta sección presentaremos las formulaciones variacionales del problema evolutivo con control de contaminantes en acuíferos los cuales están asociados con la ecuación de difusión advección:

$$\phi \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{D} \operatorname{grad} u) + \mathbf{w} \cdot \operatorname{grad} u + qu = f, \quad \text{en } \Omega \times [0, T] = Q \quad (6.1)$$

donde  $\Omega \subset R^n$ ,  $n = 1, 2, 3$ ;  $[0, T]$  es el intervalo de tiempo,  $T < +\infty$ ,  $u$  es la concentración del contaminante,  $\mathbf{D}$  es el tensor de difusión - dispersión, el cual es simétrico y uniformemente positivo definido, cuya norma  $\|\mathbf{D} \operatorname{grad} u\|_{W^{i\infty}} \rightarrow 0$  cuando la advección es dominante,  $f$  son las fuentes de contaminantes,  $\mathbf{w}$  el campo de velocidades,  $qu$  son fuentes o sumideros del fluido con contaminante, las cuales nos pueden servir como medios de control, estamos suponiendo que el fluido es incompresible.

Similarmente tomaremos las siguientes restricciones de control:

1°.- Queremos que la concentración de contaminantes, para cada punto en el acuífero y para cada tiempo, este comprendida entre dos valores,  $c_1$  y  $c_2$ , es decir:  $0 \leq c_1 \leq u(x, t) \leq c_2$ ,  $x \in \Omega$ ,  $t \in [0, T]$ .

2.-Que la concentración, o el flujo de contaminantes este en un rango prefijado en una parte de la frontera, es decir control en la frontera.

## 6.2 Mecanismos de control interior

Siguiendo con el método de subdiferenciales podemos expresar el problema de control asociado a la ecuación (6.1) en la forma abstracta:

$$\begin{aligned} u(x, t) &\in \mathfrak{D}(\phi(x, t : \cdot)) : \\ \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{D}(x) \operatorname{grad} u(x, t)) + \mathbf{w}(x, t) \cdot \operatorname{grad} u(x, t) + f(x, t) &\in \partial\phi(x, t; u(x, t)) \\ (x, t) &\in \Omega \times [0, T] = Q \end{aligned} \quad (6.2)$$

donde  $\partial\phi(x, t : \cdot) : R \rightarrow 2^R$  es un subdiferencial monótono que modela el correspondiente mecanismo interior de control respecto al conjunto convexo de valores primales admisibles  $\mathfrak{D}(\phi(x, t : \cdot)) = \{\eta \in R : \phi(x, t; \eta) < +\infty\}$ ,  $\phi(x, t : \cdot) : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  es el superpotencial que modela las restricciones de control. De la definición de subdiferencial obtenemos la desigualdad variacional:

$$\begin{aligned}
& u(x, t) \in \mathfrak{D}(\phi(x, t : \cdot)) : \\
& \left\{ \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{D}(x) \operatorname{grad} u(x, t)) + \mathbf{w}(x, t) \cdot \operatorname{grad} u(x, t) \right\} \{v(x, t) - u(x, t)\} \\
& + \phi(x, t; v(x, t)) - \phi(x, t; u(x, t)) \geq f(x, t) \{v(x, t) - u(x, t)\} \\
& \forall v(x, t) \in \mathfrak{D}(\phi(x, t : \cdot)) , \quad (x, t) \in Q
\end{aligned} \tag{6.3}$$

De acuerdo con el método de los subdiferenciales dualizamos las restricciones de control mediante la gráfica inversa de sus subdiferenciales. Es decir aplicamos la identidad de Fenchel:

$$\eta \in \mathfrak{D}(\phi(x, t : \cdot)) : \eta^* \in \partial\phi(x, t : \eta) \iff \eta^* \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, t : \cdot)) : \eta \in \partial\phi^*(x, t : \eta^*) \tag{6.4}$$

donde  $\partial\phi^*(x, t : \eta^*) : R \rightarrow 2^R$ , es el subdiferencial de la función conjugada convexa de  $\phi(x, t : \cdot)$  definida como:

$$\phi^*(x, t : \eta^*) = \sup_{\eta \in R} \{\eta^* \eta - \phi(x, t : \eta)\} \tag{6.5}$$

Introducimos la función de control o campo dual:

$$p^*(x, t) = -\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{D}(x) \operatorname{grad} u(x, t)) - \mathbf{w}(x, t) \cdot \operatorname{grad} u(x, t) + f(x, t), \quad (x, t) \in Q \tag{6.6}$$

obtenemos la formulación dual local:

$$p^*(x, t) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, t; \cdot)) : u(x, t) \in \partial\phi^*(x, t; p^*(x, t)), \quad (x, t) \in Q \tag{6.7}$$

la cual es caracterizada por la desigualdad variacional, dual a (4.3):

$$\begin{aligned}
& p^*(x, t) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, t : \cdot)) : \\
& \phi^*(x, t : q^*(x, t)) - \phi^*(x, t : p^*(x, t)) \geq u(x, t) \{q^*(x, t) - p^*(x, t)\} \\
& \forall q^*(x, t) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, t : \cdot)), \quad (x, t) \in Q
\end{aligned} \tag{6.8}$$

## 6.2.1 Ejemplo 6.1 Un control en el interior

Consideremos las típicas restricciones de control:

$$u(x, t) \in \mathfrak{D}(\phi(x, t; \cdot)) = \{u(x, t) \in R : c_1(x, t) \leq u(x, t) \leq c_2(x, t)\}, \quad (6.9)$$

donde  $c_1(x, t)$  y  $c_2(x, t)$  son cotas inferior y superior impuestas al campo primal  $u(x, t)$ . El correspondiente mecanismo de control monótono es de la forma:

$$p^*(x, t) \in \partial\phi(x, t; u(x, t)) = \begin{cases} (-\infty, 0], & u(x, t) = c_1(x, t), \\ \{0\}, & c_1(x, t) \leq u(x, t) \leq c_2(x, t), \\ [0, +\infty), & u(x, t) = c_2(x, t), \\ \phi, & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (6.10)$$

Aquí  $\partial\phi(x, t, \cdot) : R \rightarrow 2^R$  la función de control escogida es el subdiferencial de la función indicatriz  $\phi(x, t, \cdot) : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  definida como:

$$\phi(x, t; u(x, t)) = \begin{cases} 0, & c_1(x, t) \leq u(x, t) \leq c_2(x, t), \\ +\infty, & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (6.11)$$

Entonces la formulación variacional subdiferencial dual es:

$$p^*(x, t) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, t; \cdot)) = R : \quad u(x, t) \in \partial\phi^*(x, t; p^*(x, t)) = \begin{cases} \{c_1(x, t)\}, & p^*(x, t) < 0, \\ [c_1(x, t), c_2(x, t)], & p^*(x, t) = 0, \\ \{c_2(x, t)\}, & p^*(x, t) > 0, \end{cases} \quad (6.12)$$

con superpotencial dual:

$$\phi^*(x, t; p^*(x, t)) = \begin{cases} c_1(x, t)p^*(x, t), & p^*(x, t) \leq 0, \\ c_2(x, t)p^*(x, t), & p^*(x, t) \geq 0. \end{cases} \quad (6.13)$$

### 6.3 Mecanismos de control en la frontera

Similarmente, respecto a las condiciones de frontera y a las restricciones de control en la frontera, podemos caracterizarlas en términos de ecuaciones subdiferenciales de la forma general:

$$\gamma u(x, t) \in \mathfrak{D}(\psi(x, t; \cdot)) : -\frac{\partial u(x, t)}{\partial \nu} \in \partial \psi(x, t; \gamma u(x, t)), \quad (x, t) \in \Sigma = \partial \Omega \times (0, T), \quad (6.14)$$

donde  $\gamma u$  es la traza Dirichlet del campo primal  $u$  y  $\partial \psi(x, t; \cdot) : R \rightarrow 2^R$  es el subdiferencial monótono cuyos subgradientes:

$$-\frac{\partial u(x, t)}{\partial \nu} = \mathbf{D}(x) \text{gradu}(x, t) \cdot \mathbf{n}(x), \quad (x, t) \in \Sigma \quad (6.15)$$

son los valores Newman posibles de  $u$  en la frontera  $\Sigma$ . La desigualdad variacional equivalente, en terminos del superpotencial de frontera  $\psi(x, t; \cdot) : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  es:

$$\begin{aligned} \gamma u(x, t) &\in \mathfrak{D}(\psi(x, t; \cdot)) : \\ \psi(x, t; \gamma v(x, t)) - \psi(x, t; \gamma u(x, t)) &\geq -\frac{\partial u(x, t)}{\partial \nu} \{\gamma v(x, t) - \gamma u(x, t)\} \quad (6.16) \\ \forall \gamma v(x, t) &\in \mathfrak{D}(\psi(x, t; \cdot)), \quad (x, t) \in \Sigma \end{aligned}$$

#### 6.3.1 Condiciones de frontera Dirichlet

Consideremos que una condición de frontera Dirichlet  $\hat{u}$  es prescrita en una parte de la frontera  $\Sigma$ , es decir  $\Sigma_D = \partial \Omega_D \times (0, T)$ , particularizando (4.18):

$$\gamma u(x, t) \in \mathfrak{D}(\psi_D(x, t; \cdot)) = \{\hat{u}(x, t)\} : \quad (6.17)$$

$$-\frac{\partial u(x, t)}{\partial \nu} \in \partial \psi_D(x, t; \gamma u(x, t)) = R, \quad (x, t) \in \Sigma_D$$

donde el superpotencial  $\psi_D(x, t; \cdot)$  es la función indicatriz del conjunto  $\{\hat{u}(x, t)\}$ , entonces la desigualdad variacional correspondiente es:

$$\begin{aligned} \gamma u(x, t) &\in \{\hat{u}(x, t)\} : \\ 0 &\geq -\frac{\partial u(x, t)}{\partial \nu} \{\gamma v(x, t) - \gamma u(x, t)\} \quad \forall \gamma v(x, t) \in \{\hat{u}(x, t)\}, \quad (x, t) \in \Sigma \end{aligned} \quad (6.18)$$



### 6.3.2 Condiciones de frontera Newman

Consideremos que en otra parte de la frontera  $\Sigma_N = \partial\Omega_N \times (0, T)$  tenemos prescrita una condición Newman,  $g = \mathbf{D}(x)\text{gradu}(x, t) \cdot \mathbf{n}(x)$ , con:

$$\begin{aligned} \gamma u(x, t) \in \mathfrak{D}(\psi_N(x, t; \cdot)) = R : \\ -\frac{\partial u(x, t)}{\partial \nu} \in \partial\psi_N(x, t; \gamma u(x, t)) = \{g(x, t)\}, \quad (x, t) \in \Sigma_N \end{aligned} \quad (6.19)$$

aquí el superpotencial  $\psi_N(x, t; \cdot)$  es la función lineal  $g(x, t)(\cdot)$  y la desigualdad variacional que lo caracteriza es:

$$\begin{aligned} \gamma u(x, t) \in \mathfrak{D}(\psi_N(x, t; \cdot)) = R : \\ \{g(x, t)\} \{\gamma v(x, t) - \gamma u(x, t)\} \geq -\frac{\partial u(x, t)}{\partial \nu} \{\gamma v(x, t) - \gamma u(x, t)\} \\ \forall \gamma v(x, t) \in R, \quad (x, t) \in \Sigma_N \end{aligned} \quad (6.20)$$

### 6.3.3 Control en la frontera

Para completar la formulación variacional local del problema suponemos que en el resto de la frontera  $\Sigma_C = \partial\Omega_C \times (0, T)$ , donde  $\partial\Omega_C = \partial\Omega \setminus \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$ , actúa un control de frontera generalizado, con superpotencial dado por  $\psi_C(x, t; \cdot) : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$ ,  $(x, t) \in \Sigma_C$ . Dualizando estas restricciones y aplicando la identidad de Fenchel a la ecuación (6.14) restringida a  $\Sigma_C$ , obtenemos la ecuación subdiferencial dual:

$$s^* \in \mathfrak{D}(\psi_C^*(x, t; \cdot)) : \gamma u(x, t) \in \partial\psi_C^*(x, t; s^*(x, t)), \quad (x, t) \in \Sigma_C \quad (6.21)$$

donde  $s^*$  es la función de control en la frontera definida por:

$$s^*(x, t) = -\frac{\partial u(x, t)}{\partial \nu}, \quad (x, t) \in \Sigma_C \quad (6.22)$$

y  $\psi_C^*(x, t; \cdot) : R \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  es el superpotencial de frontera conjugado. La desigualdad variacional dual correspondiente es:

$$\begin{aligned} s^* \in \mathfrak{D}(\psi_C^*(x, t; \cdot)) : \\ \psi_C^*(x, t; r^*(x, t)) - \psi_C^*(x, t; s^*(x, t)) \geq \gamma u(x, t) \{r^*(x, t) - s^*(x, t)\} \\ \forall r^*(x, t) \in \mathfrak{D}(\psi_C^*(x, t; \cdot)), \quad (x, t) \in \Sigma_C. \end{aligned} \quad (6.23)$$

#### 6.4 Formulaciones variacionales globales primal y mixta:

Para construir las formulaciones variacionales globales primal y mixta del problema de control en el interior y en la frontera, seguimos aplicando la metodología de Alduncin G. [3].

Una vez que las formulaciones variacionales locales han sido dadas, procedemos a construir las formulaciones variacionales globales en espacios de Sobolev, para esto requerimos en primer lugar la regularidad fuerte siguiente para los datos:

$$(\mathbf{D}, \mathbf{w}, f, \hat{u}, g) \in \mathbf{W}^{1,\infty}(\Omega) \times \mathbf{L}^2(0, T; L^\infty \Omega) \times L^2(Q) \times L^2(0, T; H^{\frac{3}{2}}(\partial\Omega_D)) \times L^2(0, T; H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_N)), \quad Q = \Omega \times [0, T]. \quad (6.24)$$

##### 6.4.1 Formulación variacional primal

A partir de las desigualdades variacionales locales (6.3), (6.18), (6.20) y (6.16) restringida a  $\Sigma_C$ , con condiciones de frontera Dirichlet (6.17), Newman (6.19) y datos iniciales  $u_0 \in H^1(\Omega)$ . Integrando por partes y aplicando la fórmula de Green (4.10), [3], [19], obtenemos la formulación variacional primal pseudoinstantánea del problema evolutivo con control interior y en la frontera:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \in \mathfrak{U}, \text{ con } u(0) = u_0 \in K(0) \text{ y } t \in (0, T), u(t) \in K(t) : \\ \int_{\Omega} \frac{\partial u(t)}{\partial t} \{v(t) - u(t)\} d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{D}(x) \text{grad } u(t)) \{\text{grad } v(t) - \text{grad } u(t)\} d\Omega \\ + \int_{\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \text{grad } u(t) \{v(t) - u(t)\} d\Omega + \int_{\Omega} \phi(t; v(t)) d\Omega - \int_{\Omega} \phi(t; u(t)) d\Omega \\ + \int_{\Omega_C} \psi_C(t; \gamma v(t)) d\partial\Omega - \int_{\Omega_C} \psi_C(t; \gamma u(t)) d\partial\Omega \\ \geq \int_{\Omega} f(t) \{v(t) - u(t)\} d\Omega - \int_{\Omega_N} g(t) \{\gamma v(t) - \gamma u(t)\} d\partial\Omega, \forall v(t) \in K(t) \end{array} \right. \quad (6.25)$$

donde  $\mathfrak{U} = \{v \in L^2(0, T; H^1(\Omega)) : \frac{\partial v}{\partial t} \in L^2(Q)\}$  y  $K(t)$  con  $t \in [0, T]$  es la familia de campos primales admisibles, las cuales son funciones en el espacio de Hilbert-Sobolev  $H^1(\Omega)$  que satisfacen las restricciones de control en el interior y en la frontera, así como las condiciones de frontera Dirichlet y Newman y se definen como:

$$K(t) = \left\{ \begin{array}{ll} v \in H^1(\Omega) : v(x) \in \mathfrak{D}(\phi(x, t; \cdot)), & x \in \Omega, y \\ \gamma v(x) \in \mathfrak{D}(\psi_C(x, t; \cdot)), & x \in \partial\Omega_C, y \\ \gamma v(x) = \hat{u}(x, t), & x \in \partial\Omega_D \end{array} \right\} \quad (6.26)$$

## 6.4.2 Ecuación subdiferencial primal global

Consideremos, para toda  $t \in (0, T)$ , los operadores variacionales lineales continuos  $A, B(t) \in L(H^1(\Omega), (H^1(\Omega))')$  asociados a las formas bilineales de difusión y advección del problema:

$$(Au, v) = \int_{\Omega} \mathbf{D} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega, \quad u, v \in H^1(\Omega) \quad (6.27)$$

$$(B(t)u, v) = \int_{\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \nabla u \, v \, d\Omega, \quad u, v \in H^1(\Omega) \quad (6.28)$$

y a la forma lineal continua  $b(t) \in (H^1(\Omega))'$ :

$$\langle b(t), v \rangle = \int_{\Omega} f(t) v \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(t) \gamma v \, d\partial\Omega, \quad v \in H^1(\Omega) \quad (6.29)$$

donde  $\langle \rangle$  representa el par de dualidad de  $(H^1(\Omega))' \times H^1(\Omega)$ .

Consideremos también las funcionales convexas globales  $\Phi(t) : H^1(\Omega) \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  y  $\Psi_C(t) : H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_C) \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  tales que:

$$\Phi(t)(q) = \int_{\Omega} \phi(t; q) \, d\Omega, \quad q \in H^1(\Omega), \quad (6.30)$$

$$\Psi_C(t) = \int_{\partial\Omega_C} \psi_C(t; r) \, d\partial\Omega, \quad r \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_C), \quad (6.31)$$

suponiendo que sus subdiferenciales satisfacen la igualdad de conjuntos:

$$\begin{aligned} & \partial(\Phi(t) + \Psi_C(t) \circ \gamma_{\partial\Omega_C} + I_{\{\hat{u}(t)\}} \circ \gamma_{\partial\Omega_C})(u(t)) \\ &= \partial\Phi(t)(u(t)) + \partial(\Psi_C(t) \circ \gamma_{\partial\Omega_C})(u(t)) + \partial(I_{\{\hat{u}(t)\}} \circ \gamma_{\partial\Omega_D})(u(t)) \end{aligned} \quad (6.32)$$

donde  $\gamma_{\partial\Omega_C} \in L(H^1(\Omega), (H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_C)))$  y  $\gamma_{\partial\Omega_D} \in L(H^1(\Omega), (H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_D)))$  son los operadores traza Dirichlet y  $I_{\{\hat{u}(t)\}}$  es la función indicatriz del conjunto  $\{\hat{u}(t)\} \subset H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_D)$ . Esta puede ser considerada físicamente como las condiciones de compatibilidad entre las restricciones interior y de frontera y los datos de frontera Dirichlet del problema.

Entonces la desigualdad variacional primal (6.25), tiene como ecuación subdiferencial global:

$$-\frac{\partial u(t)}{\partial t} - Au(t) - B(t)u(t) + b(t) \in \partial\Phi(t)(u(t)) + \partial(\Psi_C(t) \circ \gamma_{\partial\Omega_C})(u(t)) + \partial(I_{\{\widehat{u}(t)\}} \circ \gamma_{\partial\Omega_D})(u(t)) \quad (6.33)$$

### 6.4.3 Formulaci3n variacional Mixta Dual

Continuando con el m3todo de los subdiferenciales, de las desigualdades variacionales duales (6.6), (6.23) y las desigualdades variacionales primales (6.18) y (6.20) obtenemos la formulaci3n variacional global mixta dual pseudo instant3nea, con restricciones interior y en la frontera dualizadas:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (u, p^*, s^*) \in U \times L^2(Q) \times L^2(\Sigma_C) \text{ con } u(0) \in K_{\widehat{u}(0)} \\ \text{y para toda } t \in (0, T), (u(t), p^*(t), s^*(t)) \in K_{\widehat{u}(t)} \times C_I(t) \times C_B(t) : \\ \\ \int_{\Omega} \frac{\partial u(t)}{\partial t} \{v(t) - u(t)\} d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{D}(x) \text{ grad } u(t)) \{\text{grad } v(t) - \text{grad } u(t)\} d\Omega \\ + \int_{\Omega} w(t) \cdot \text{grad } u(t) \{v(t) - u(t)\} d\Omega \geq \int_{\Omega} \{f(t) - p^*(t)\} \{v(t) - u(t)\} d\Omega \\ \\ - \int_{\partial\Omega_N} g(t) \{\gamma v(t) - \gamma u(t)\} d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} s^*(t) \{\gamma v(t) - \gamma u(t)\} d\partial\Omega, \forall v(t) \in K_{\widehat{u}(t)}, \\ \\ \int_{\Omega} \phi^*(t; q^*(t)) d\Omega - \int_{\Omega} \phi^*(t; p^*(t)) d\Omega \geq \int_{\Omega} u(t) \{q^*(t) - p^*(t)\} d\Omega, \forall q^*(t) \in C_I(t), \\ \\ \int_{\partial\Omega_C} \psi_C^*(t; r^*(t)) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} \psi_C^*(t; s^*(t)) d\partial\Omega \geq \int_{\partial\Omega_C} \gamma u(t) \{r^*(t) - s^*(t)\} d\partial\Omega, \\ \\ \forall r^*(t) \in C_B(t). \end{array} \right. \quad (6.34)$$

Debemos notar que en esta formulaci3n mixta las restricciones de control interior y en la frontera aparecen dualizadas en la definici3n de los dominios efectivos duales:

$$C_I(t) = \{q^* \in L^2(\Omega) : q^*(x) \in \mathfrak{D}(\phi^*(x, t; \cdot)), \quad x \in \Omega\}, \quad (6.35)$$

$$C_B(t) = \{r^* \in L^2(\partial\Omega_C) : r^*(x) \in \mathfrak{D}(\psi_C^*(x, t; \cdot)), \quad x \in \partial\Omega_C\} \quad (6.36)$$

y consecuentemente los campos primales admisibles unicamente tienen que llenar las condiciones de frontera Dirichlet perteneciendo a:

$$K_{\widehat{u}(t)} = \{v \in H^1(\Omega) : \gamma v(x) = \widehat{u}(x, t), \quad x \in \partial\Omega_D\}, \quad (6.37)$$

entonces la primer ecuación de (6.34) es equivalente a:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial u(t)}{\partial t} v(t) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{D}(x) \operatorname{grad} u(t) \cdot \operatorname{grad} v(t) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \operatorname{grad} u(t) v(t) d\Omega \\ & = \int_{\Omega} \{f(t) - p^*(t)\} v(t) d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(t) \gamma v(t) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} s^*(t) \gamma v(t) d\partial\Omega, \quad \forall v(t) \in K_0, \end{aligned} \quad (6.38)$$

con variaciones pertenecientes a:

$$K_0 = \{v \in H^1(\Omega) : \gamma v(x) = 0, \quad x \in \partial\Omega_D\}. \quad (6.39)$$

#### 6.4.4 Ecuación subdiferencial mixta global

Denotando por  $(\gamma_{\partial\Omega_C})' \in L(H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega_C), (H^1(\Omega))')$  al operador adjunto del operador traza  $\gamma_{\partial\Omega_C} \in L(H^1(\Omega), H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_C))$  y por  $\Phi^*(t) : (H^1(\Omega))' \rightarrow R \cup \{+\infty\}$ ,  $\Psi_C^* : H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega_C) \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  los funcionales cojugados de (6.30) y (6.31), las ecuaciones subdiferenciales globales del problema mixto dual son:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial u(t)}{\partial t} - Au(t) - B(t)u(t) + b(t) - p^*(t) - (\gamma_{\partial\Omega_C})' s^*(t) & \in \partial(I_{\{\bar{u}(t)\}} \circ \gamma_{\partial\Omega_D})(u(t)), \\ u(t) & \in \partial\Phi^*(t; p^*(t)), \\ \gamma_{\partial\Omega_C} u(t) & \in \partial\Psi_C^*(t; s^*(t)). \end{aligned} \quad (6.40)$$

#### 6.4.5 Relación entre los problemas primal y mixto

Tomando en cuenta la identidad de Fenchel de invertibilidad y la igualdad [16]:

$$\partial(\Psi_C(t) \circ \gamma_{\partial\Omega_C}) = (\gamma_{\partial\Omega_C})' \circ \partial\Psi_C(t) \circ \gamma_{\partial\Omega_C} \quad (6.41)$$

de las ecuaciones subdiferenciales (6.33) y (6.40) podemos concluir directamente la relación entre los problemas primal y mixto:

*Teorema 6.1* Si  $u$  es solución del problema primal (6.25) entonces existen funciones  $(p^*, s^*)$  :

$$p^*(t) \in \partial\Phi(t; u(t)), \quad (6.42)$$

$$(\gamma_{\partial\Omega_C})'s^* \in \partial\Psi_C(t) \circ \gamma_{\partial\Omega_C}(u(t)), \quad t \in (0, T),$$

tales que  $(u, p^*, s^*)$  son solución del problema mixto (6.34). Inversamente si  $(u, p^*, s^*)$  son solución del problema mixto (6.34) entonces las ecuaciones multivaluadas (6.40) son válidas y  $u$  es una solución del problema primal (6.25)  $\square$

## 6.5 Propiedades cualitativas de la solución

En esta sección analizaremos algunas propiedades cualitativas de las soluciones del problema, como son las de existencia y unicidad, la ley de conservación de la masa y el principio del máximo. Propiedades cualitativas que deberán preservarse por los esquemas de aproximación, por último estableceremos el comportamiento asintótico de la solución cuando el tiempo tiende a infinito. Para esto se requiere que sus formas bilineales sean positivas, para lo cual suponemos que el campo de velocidades  $\mathbf{w}$  satisface, en el complemento de la frontera Dirichlet, la condición de compatibilidad siguiente:

$$\mathbf{w}(x, t) \cdot \mathbf{n}(x) \geq 0, \quad (x, t) \in \Sigma_N \cup \Sigma_C, \quad (6.43)$$

es decir el flujo en la frontera Newman y en la frontera de control es hacia afuera. Entonces, bajo esta condición y de la identidad:

$$(B(t)u, v) = -(B(t)v, u) + \int_{\partial\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \mathbf{n} \gamma u \gamma v \, d\partial\Omega, \quad u, v \in H^1(\Omega) \quad (6.44)$$

vemos que la componente no simétrica (6.28) es positiva en  $K_0$ , y consecuentemente, la forma bilineal  $(A\cdot, \cdot) + (B\cdot, \cdot) : H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \rightarrow R$  es uniformemente  $K_0$  - *semicoerciva*, es decir, para toda  $t \in (0, T)$  existen constantes  $\alpha, c$ , con  $\alpha \geq c \geq 0$  tales que:

$$(Av, v) + (B(t)v, v) + c \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq \alpha \|v\|_{H^1(\Omega)}^2, \quad \forall v \in K_0. \quad (6.45)$$

además si:

$$\text{meas}(\partial\Omega_D) \neq 0 \Leftrightarrow K_0 \text{ es un subespacio propio de } H^1(\Omega), \quad (6.46)$$

entonces la forma bilineal es uniformemente  $K_{\tilde{u}(t)}$  – *coerciva* y (6.45) es valida fuertemente con  $c = 0$ :

$$(Av, v) + (B(t)v, v) \geq \alpha \|v\|_{H^1(\Omega)}^2, \quad \forall v \in K_0. \quad (6.47)$$

### 6.5.1 Unicidad de la solución

*Teorema 6.2* Bajo la condición (6.43), los problemas primal (6.25) y mixto (6.34) poseen al menos una solución y esta es única.

*Prueba (de la unicidad).* Sean  $u$  y  $\tilde{u}$  dos soluciones del problema primal (6.25). Entonces escogiendo respectivamente  $v = u$  y  $v = \tilde{u}$ , sumando las desigualdades resultantes y tomando en cuenta la positividad de la forma bilineal tenemos que:

$$\frac{d}{dt} \|u(t) - \tilde{u}(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0, \quad \forall t \in (0, T), \quad (6.48)$$

como  $u(0) + \tilde{u}(0) = 0$  entonces  $u(t) = \tilde{u}(t)$ .

Similarmente, supongamos  $(u, p^*, s^*)$  y  $(\tilde{u}, \tilde{p}^*, \tilde{s}^*)$  son soluciones del problema mixto (6.34), y por (6.48),  $u(t) = \tilde{u}(t)$ , entonces sustrayendo las igualdades (6.38) correspondientes, obtenemos:

$$\langle p^*(t) - \tilde{p}^*(t), v \rangle_{H^1(\Omega)} + (s^*(t) - \tilde{s}^*(t), \gamma v)_{(H^{\frac{1}{2}}\partial\Omega_C)} = 0, \quad \forall v \in K_0 \text{ y } t \in (0, T), \quad (6.49)$$

de lo cual  $p^* = \tilde{p}^*$  y  $s^* = \tilde{s}^*$ .  $\square$

### 6.5.2 Ley de conservación de la Masa

La ley de conservación de la masa del sistema es una consecuencia de su principio variacional primal, en el caso de frontera Newman:

$$\partial\Omega = \partial\Omega_N \cup \partial\Omega_C, \quad meas(\partial\Omega_D) = 0 \Leftrightarrow K_0 = H^1(\Omega) \quad (6.50)$$

*Teorema 6.3* En el caso (6.50), es decir que toda la frontera sea Newmann, el sistema satisface la ecuación de balance:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial u(t)}{\partial t} d\Omega \\ & = \int_{\Omega} \{f(t) - p^*(t)\} d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(t) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} s^*(t) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \mathbf{n} \gamma u(t) d\partial\Omega, t \in (0, T) \end{aligned} \quad (6.51)$$

*Prueba.* De la igualdad variacional (6.38), escogiendo  $v = 1$ , y aplicando la identidad (6.44) obtenemos (6.51).  $\square$

Es decir, la razón de incremento del campo primal  $u$  en  $\Omega$  es igual a su producción debida a las fuentes prescritas y las de control en el interior de  $\Omega$  y a los flujos prescritos y de control en la frontera, menos la razón a la cual es arrastrado fuera de  $\Omega$ , cruzando la frontera  $\partial\Omega$ .

### 6.5.3 Principio del máximo

Enseguida establecemos una versión simplificada del principio del máximo [18] para el problema primal.

*Teorema 6.4* Sea la condición  $\mathbf{w}(x, t) \cdot \mathbf{n}(x) \geq 0$ ,  $(x, t) \in \Sigma_N \cup \Sigma_C$ , válida. Sean los funcionales definidos en (6.30) y (6.31) tales que para toda  $t \in (0, T)$  :

$$\begin{aligned} \Phi(t; 0) - \Phi(t; \xi) &\leq 0, & \forall \xi \leq 0, \\ \Psi_C(t; 0) - \Psi_C(t; \xi) &\leq 0, & \forall \xi \leq 0, \end{aligned} \tag{6.52}$$

y sea la forma lineal  $\langle b(t), v \rangle = \int_{\Omega} f(t) v \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(t) \gamma v \, d\partial\Omega$ , tal que:

$$f \geq 0 \quad \text{en } Q, \text{ y } -g \geq 0 \quad \text{en } \Sigma_N \tag{6.53}$$

entonces, si la frontera Dirichlet y los datos iniciales son también positivos:

$$\hat{u} \geq 0 \quad \text{en } \Sigma_D, \text{ y } u_0 \geq 0 \quad \text{en } \Omega, \tag{6.54}$$

las soluciones del problema primal (6.25) son positivas:

$$u \geq 0 \quad \text{en } Q. \tag{6.55}$$

*Prueba.* Como  $u^-(t) \equiv \sup\{-u(t), 0\} = u^+(t) - u(t)$  y por hipótesis la forma bilineal es positiva, tomando  $v(t) = \sup\{u(t), 0\}$  en la desigualdad (6.25), lo cual es posible porque  $\hat{u} \geq 0$ , obtenemos:

$$\frac{d}{dt} \|u^-(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0, \quad \forall t \in (0, T), \tag{6.56}$$

Entonces  $u^- = 0$  porque  $u_0 \geq 0$ , y por consiguiente  $u(t) = u^+(t)$  para toda  $t \in (0, T)$ .  $\square$



#### 6.5.4 Estabilidad

*Teorema 6.5* Sean el campo de velocidades  $\mathbf{w}$ , los funcionales de control  $\Phi$  y  $\Psi_C$ , y los datos interior y de frontera Dirichlet  $f$  y  $\hat{u}$ , todos independientes del tiempo. Sean también satisfechas las condiciones (6.43) y (6.46). Entonces si  $u$  es una solución del problema evolutivo primal (6.25), la solución  $u_\infty$  del correspondiente estado estacionario del problema:

$$-Au_\infty - Bu_\infty + f \in \partial\Phi(u_\infty) + \partial(\Psi_C \circ \gamma_{|\partial\Omega_C})(u_\infty) + \partial(I_{\{\hat{u}\}} \circ \gamma_{|\partial\Omega_C})(u_\infty) \quad (6.57)$$

es globalmente exponencialmente estable, es decir, para cualquier condición inicial  $u_0 \in K_0$ , y  $\alpha > 0$ :

$$\|u(t) - u_\infty\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0 - u_\infty\|_{L^2(\Omega)} e^{-\alpha t}, \quad t > 0, \quad (6.58)$$

*Prueba.* Tomando  $v = u_\infty$  en (6.25) y  $v = u(t)$  en la correspondiente desigualdad de (6.57), sumando y aplicando la propiedad de coercitividad (6.45) llegamos a:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u(t) - u_\infty\|_{L^2(\Omega)} + \alpha \|u(t) - u_\infty\|_{L^2(\Omega)} \leq 0, \quad t > 0, \quad (6.59)$$

de la cual, por integración, llegamos a (6.58).  $\square$

## 6.6 Aproximación semidiscreta de elemento finito

Siguiendo con el método de los subdiferenciales, introducimos la aproximación abstracta interna de los problemas variacionales (6.25), (6.34), tomando en cuenta (6.38), construimos los esquemas de elemento finito:

### 6.6.1 Aproximaciones internas semidiscretas

Sean  $V_h \subset H^1(\Omega)$ ,  $U_h \subset L^2(\Omega)$  y  $W_h \subset L^2(\partial\Omega_C)$  tres familias de subespacios de dimensión finita, con el parámetro  $h > 0$ , y dimensiones  $m_h$ ,  $r_h$ , y  $s_h \rightarrow \infty$  cuando  $h \rightarrow 0$ . Sean  $\mathfrak{U}_h = \{v_h \in L^2(0, T; V_h) : \frac{\partial v}{\partial t} \in L^2(Q)\}$ . Sean  $K_h(t) \subset V_h$ ,  $K_{\hat{u}_h(t)} \subset V_h$ ,  $K_{0_h} \subset V_h$ ,  $C_{I_h} \subset U_h$  y  $C_{B_h} \subset W_h$ , para toda  $t \in (0, T)$ , las familias correspondientes de conjuntos convexos de campos primales admisibles  $K(t) \subset H^1(\Omega)$ ,  $K_{\hat{u}(t)} \subset H^1(\Omega)$  y campos duales  $C_I(t) \subset L^2(\Omega)$  y  $C_B(t) \subset L^2(\partial\Omega_C)$  ya definidos con anterioridad.

### Aproximación abstracta interna primal

Entonces, para  $\{u_{0_h} \in K_h(0)\}_{h>0}$ , una sucesión fuertemente convergente en  $H^1(\Omega)$ , a la condición inicial  $u_0 \in K(0)$ , una aproximación interna abstracta del problema primal (6.25), está definida por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u_h \in \mathfrak{U}_h, \text{ con } u_h(0) = u_{0_h} \in K_h(0) \text{ y } t \in (0, T), u_h(t) \in K_h(t) : \\ \int_{\Omega} \frac{\partial u_h(t)}{\partial t} \{v_h(t) - u_h(t)\} d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{D}(x) \text{grad} u_h(t)) \{ \text{grad} v_h(t) - \text{grad} u_h(t) \} d\Omega \\ + \int_{\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \text{grad} u(t) \{v_h(t) - u_h(t)\} d\Omega + \int_{\Omega} \phi(t; v_h(t)) d\Omega - \int_{\Omega} \phi(t; u_h(t)) d\Omega \\ + \int_{\partial\Omega_C} \psi_C(t; \gamma v_h(t)) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} \psi_C(t; \gamma u_h(t)) d\partial\Omega \\ \geq \int_{\Omega} f(t) \{v_h(t) - u_h(t)\} d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(t) \{ \gamma v_h(t) - \gamma u_h(t) \} d\partial\Omega, \quad \forall v_h(t) \in K_h(t) \end{array} \right. \quad (6.60)$$

### Aproximación abstracta interna mixta

Similarmente, para  $\{u_{0_h} \in K_{\hat{u}(0)}\}_{h>0}$ , una sucesión en  $H^1(\Omega)$  fuertemente convergente a la condición inicial  $u_0 \in K_{\hat{u}(0)}$ , la aproximación interna abstracta del problema mixto (6.34) tomando en cuenta (6.38), se define como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (u_h, p_h^*, s_h^*) \in \mathfrak{U}_h \times L^2(0, T; U_h) \times L^2(0, T; W_h) \text{ con } u_h(0) \in K_{\hat{u}_h(0)} \\ \text{y para toda } t \in (0, T), (u_h(t), p_h^*(t), s_h^*(t)) \in K_{\hat{u}_h(0)} \times C_{I_h}(t) \times C_{B_h}(t) : \\ \int_{\Omega} \frac{\partial u_h(t)}{\partial t} v_h(t) d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{D}(x) \text{grad} u_h(t)) \cdot \text{grad} v_h(t) d\Omega \\ + \int_{\Omega} w(t) \cdot \text{grad} u_h(t) v_h(t) d\Omega = \int_{\Omega} \{f(t) - p^*(t)\} v_h(t) d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} g(t) \gamma v_h(t) d\partial\Omega \\ - \int_{\partial\Omega_C} s^*(t) \gamma v_h(t) d\partial\Omega, \quad \forall v_h(t) \in K_{0_h}, \\ \int_{\Omega} \phi^*(t; q_h^*(t)) d\Omega - \int_{\Omega} \phi^*(t; p_h^*(t)) d\Omega \geq \int_{\Omega} u_h(t) \{q_h^*(t) - p_h^*(t)\} d\Omega, \quad \forall q_h^*(t) \in C_{I_h}(t), \\ \int_{\partial\Omega_C} \psi_C^*(t; r_h^*(t)) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} \psi_C^*(t; s_h^*(t)) d\partial\Omega \geq \int_{\partial\Omega_C} \gamma u_h(t) \{r_h^*(t) - s_h^*(t)\} d\partial\Omega, \\ \forall r_h^*(t) \in C_{B_h}(t). \end{array} \right. \quad (6.61)$$

### 6.6.2 Versión de coordenadas de los problemas semidiscretos

Ahora deduciremos las versiones de coordenadas correspondientes a  $R^{m_h}$ ,  $R^{r_h}$ ,  $R^{s_h}$ , de los problemas (6.60) y (6.61). Para esto, los subespacios de dimensión finita  $V_h$ ,  $U_h$ , y  $W_h$  son dados en términos de las bases generalizadas:

$$\begin{aligned}
 V_h &= \text{span} \{ \zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_{m_h} \} \subset H^1(\Omega), \\
 U_h &= \text{span} \{ \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{r_h} \} \subset L^2(\Omega), \\
 W_h &= \text{span} \{ \chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{s_h} \} \subset L^2(\partial\Omega).
 \end{aligned} \tag{6.62}$$

Entonces, denotando por  $\boldsymbol{\alpha}(t) \in R^{m_h}$ ,  $\boldsymbol{\lambda}^*(t) \in R^{r_h}$  y  $\boldsymbol{\mu}^*(t) \in R^{s_h}$  los vectores coordenados de los campos semidiscretos  $u_h(t) \in V_h$ ,  $p_h^*(t) \in U_h$  y  $s_h^*(t) \in W_h$ , respecto a las bases (6.62) respectivamente. Tenemos las versiones semidiscretas:

#### Versión semidiscreta primal

Para toda  $t \in (0, T)$ ,

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Encontrar } \boldsymbol{\alpha}(t) \in K^{m_h}(t), \text{ con } \boldsymbol{\alpha}(0) = \boldsymbol{\alpha}_0 \in K^{m_h}(0) : \\
 \left\{ \mathbf{M} \frac{d\boldsymbol{\alpha}(t)}{dt} + \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}(t) + \mathbf{B}(t)\boldsymbol{\alpha}(t) \right\} \cdot \{ \boldsymbol{\beta}(t) - \boldsymbol{\alpha}(t) \} + \Phi(t; \boldsymbol{\beta}(t)) - \Phi(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) \\
 + \Psi_C(t; \boldsymbol{\beta}(t)) - \Psi_C(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) \geq \{ \mathbf{f}(t) - \mathbf{g}(t) \} \cdot \{ \boldsymbol{\beta}(t) - \boldsymbol{\alpha}(t) \}, \forall \boldsymbol{\beta}(t) \in K^{m_h}(t).
 \end{array} \right. \tag{6.63}$$

#### Versión semidiscreta mixta

Para toda  $t \in (0, T)$ ,

$$\left\{ \begin{array}{l}
\text{Encontrar } (\boldsymbol{\alpha}(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t), \boldsymbol{\mu}^*(t)) \in K_{\hat{u}_h}^{m_h}(t) \times C_I^{r_h}(t) \times C_B^{s_h}(t), \text{ con } \boldsymbol{\alpha}(0) = \boldsymbol{\alpha}_0 \in K_{\hat{u}_h}^{m_h}(0) : \\
\left\{ \mathbf{M} \frac{d\boldsymbol{\alpha}(t)}{dt} + \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}(t) + \mathbf{B}(t)\boldsymbol{\alpha}(t) \right\} \cdot \boldsymbol{\beta}(t) = \{ \mathbf{f}(t) - \mathbf{g}(t) - \mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}^*(t) - \mathbf{D}^T \boldsymbol{\mu}^*(t) \} \cdot \boldsymbol{\beta}(t), \\
\forall \boldsymbol{\beta}(t) \in K_0^{m_h}, \\
\tilde{\Phi}_h^*(t; \boldsymbol{\eta}^*(t)) - \tilde{\Phi}_h^*(t; \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \geq \mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}(t) \cdot \{ \boldsymbol{\eta}^*(t) - \boldsymbol{\lambda}^*(t) \}, \quad \forall \boldsymbol{\eta}^*(t) \in C_I^{r_h}(t), \\
\tilde{\Psi}_{C_h}^*(t; \boldsymbol{\nu}^*(t)) - \tilde{\Psi}_{C_h}^*(t; \boldsymbol{\mu}^*(t)) \geq \mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}(t) \cdot \{ \boldsymbol{\nu}^*(t) - \boldsymbol{\mu}^*(t) \}, \quad \forall \boldsymbol{\nu}^*(t) \in C_B^{s_h}(t).
\end{array} \right. \quad (6.64)$$

Donde  $\boldsymbol{\alpha}_0 \in R^{m_h}$  es el vector de coordenadas de los datos iniciales  $u_{0_h} \in V_h$ ,  $K^{m_h}(t)$ ,  $K_{\hat{u}_h}^{m_h}(t)$  y  $K_0^{m_h}$  son las versiones en  $R^{m_h}$  de  $K_h(t)$ ,  $K_{\hat{u}_h}(t)$  y  $K_{0_h}$ ;  $C_I^{r_h}(t)$  y  $C_B^{s_h}(t)$  son las versiones en  $R^{r_h}$  y  $R^{s_h}$  de  $C_{I_h}(t)$  y  $C_{B_h}(t)$ . Para  $i, j = 1, 2, \dots, m_h$ ,  $r = 1, 2, \dots, r_h$ ,  $s = 1, 2, \dots, s_h$  y  $t \in (0, T)$  :

$$\begin{aligned}
M_{ij} &= \int_{\Omega} \zeta_j \zeta_i d\Omega, & (6.65) \\
A_{ij} &= \int_{\Omega} \mathbf{D} \operatorname{grad} \zeta_j \cdot \operatorname{grad} \zeta_i d\Omega, \\
B_{ij} &= \int_{\Omega} \mathbf{w}(t) \cdot \operatorname{grad} \zeta_j \zeta_i d\Omega, \\
\Phi_h(t; \boldsymbol{\beta}) &= \int_{\Omega} \phi(t; \sum_{i=1}^{m_h} \beta_i \zeta_i) d\Omega, \quad \boldsymbol{\beta}(t) \in K^{m_h}(t), \\
\Psi_{C_h}(t; \boldsymbol{\beta}) &= \int_{\Omega_C} \psi_C(t; \sum_{i=1}^{m_h} \beta_i \gamma \zeta_i) d\Omega, \quad \boldsymbol{\beta}(t) \in K^{m_h}(t), \\
f_i(t) &= \int_{\Omega} f(t) \zeta_i d\Omega, \\
g_i(t) &= \int_{\partial\Omega_N} g(t) \gamma \zeta_i d\partial\Omega, \\
C_{ri} &= \int_{\Omega} \zeta_i \xi_r d\Omega, \\
D_{si} &= \int_{\partial\Omega_C} \gamma \zeta_i \chi_s d\Omega,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_h^*(t; \boldsymbol{\eta}^*(t)) &= \int_{\Omega} \phi^*(t; \sum_{r=1}^{r_h} \eta_r^* \xi_r) d\Omega, & \boldsymbol{\eta} &\in C_I^{r_h}(t), \\ \tilde{\Psi}_{C_h}^*(t; \boldsymbol{\nu}^*(t)) &= \int_{\Omega_C} \psi_C^*(t; \sum_{s=1}^{s_h} \nu_s^* \chi_s) d\Omega, & \boldsymbol{\nu} &\in C_B^{s_h}(t).\end{aligned}$$

### 6.6.3 Ecuaciones subdiferenciales semidiscretas

Si suponemos que los subdiferenciales de la versión discreta cumplen la condición (6.32) entonces tenemos para los problemas primal (6.63) y mixto (6.64), las siguientes ecuaciones subdiferenciales.

#### Ecuación subdiferencial primal

$$-\mathbf{M} \frac{d\boldsymbol{\alpha}(t)}{dt} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}(t) - \mathbf{B}(t)\boldsymbol{\alpha}(t) + \mathbf{f}(t) - \mathbf{g}(t) \in \partial\Phi_h(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) + \partial\Psi_{C_h}(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) + \partial I_{K_{\hat{u}_h}^{m_h}(t)}(\boldsymbol{\alpha}(t)), \quad (6.66)$$

#### Ecuación subdiferencial mixta

$$-\mathbf{M} \frac{d\boldsymbol{\alpha}(t)}{dt} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}(t) - \mathbf{B}(t)\boldsymbol{\alpha}(t) + \mathbf{f}(t) - \mathbf{g}(t) - \mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}^*(t) - \mathbf{D}^T \boldsymbol{\mu}^*(t) \in \partial I_{K_{\hat{u}_h}^{m_h}(t)}(\boldsymbol{\alpha}(t)),$$

$$\mathbf{C}(\boldsymbol{\alpha}(t)) \in \partial\tilde{\Phi}_h^*(t; \boldsymbol{\lambda}^*(t)),$$

$$\mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}(t) \in \tilde{\Psi}_{C_h}^*(t; \boldsymbol{\mu}^*(t)).$$

(6.67)

#### Relación entre los problemas semidiscretos primal y mixto

Es necesario hacer notar que los subdiferenciales  $\Phi_h$ ,  $\Psi_{C_h}$ ,  $\tilde{\Phi}_h^*$  y  $\tilde{\Psi}_{C_h}^*$  no son conjugados uno del otro, respectivamente, por lo que la versión semidiscreta del *Teorema 6.1* no se aplica directamente a los problemas (6.63) y (6.64). Una versión del problema primal (6.66) compatible, en el sentido del *Teorema 6.1*, con con el problema mixto (6.67) es:

$$\begin{aligned}-\mathbf{M} \frac{d\boldsymbol{\alpha}(t)}{dt} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}(t) - \mathbf{B}(t)\boldsymbol{\alpha}(t) + \mathbf{f}(t) - \mathbf{g}(t) \\ \in \partial(\tilde{\Phi}_h(t) \circ \mathbf{C})(\boldsymbol{\alpha}(t)) + \partial(\tilde{\Psi}_{C_h}(t) \circ \mathbf{D})(\boldsymbol{\alpha}(t)) + \partial I_{K_{\hat{u}_h}^{m_h}(t)}(\boldsymbol{\alpha}(t)),\end{aligned} \quad (6.68)$$

donde  $\tilde{\Phi}_h(t) : R^{r_h} \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  y  $\tilde{\Psi}_{C_h}(t) : R^{r_h} \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  son los funcionales primales de  $\tilde{\Phi}_h^*(t) : C_I^{r_h} \rightarrow R$  y  $\tilde{\Psi}_{C_h}^*(t) : C_I^{r_h} \rightarrow R$  respectivamente.

## 6.7 Aproximación completamente discreta

En esta sección aplicaremos la aproximación de elemento finito, y para la discretización en el tiempo un esquema semi-implícito de Euler para el problema primal (6.63) y un esquema  $\theta$  para el problema mixto (6.64).

### 6.7.1 Espacios de elemento finito

Consideremos una triangulación del dominio espacial del problema:

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{r=1}^N E_r, \quad \overset{\circ}{E}_r \cap \overset{\circ}{E}_s = \emptyset \text{ si } r \neq s, \quad (6.69)$$

donde  $\overset{\circ}{E}_r$  es el interior del elemento finito geométrico  $E_r$ . Entonces definimos las funciones base de elemento finito  $\{\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_{m_h}\} \subset V_h$ ,  $\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{r_h}\} \subset U_h$ ,  $\{\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{s_h}\} \subset W_h$  como funciones interpolantes lagrangeanas de tipo (1) y tipo (0) respectivamente, es decir las funciones base de  $V_h$  son globalmente continuas y lineales punto a punto, las de  $U_h$  y  $W_h$  son globalmente discontinuas y localmente constantes. Los espacios que definen son:

$$\begin{aligned} V_h &= \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}) : v_h|_{E_r} \in P_{\leq 1}(E_r), \quad r = 1, 2, \dots, N\}, \\ U_h &= \left\{ r_h^* \in L^\infty(\Omega) : r_h^*|_{E_r} \in P_{=0}(E_r), \quad r = 1, 2, \dots, N, \right\} \\ W_h &= \left\{ q_h^* \in L^\infty(\partial\Omega_C) : q_h^*|_{\partial E_r \cap \partial\Omega_C} \in P_{=0}(\partial E_r \cap \partial\Omega_C), \quad r = 1, 2, \dots, N, \right\} \end{aligned} \quad (6.70)$$

En lo que sigue, suponemos que el dominio  $\Omega$  del problema es un subconjunto poligonal de  $R^2$  y su triangulación de elemento finito es del tipo agudo débil, es decir, todos los ángulos de los triángulos  $E_r$ ,  $r = 1, 2, \dots, N$ , son  $\leq \frac{\pi}{2}$ . Entonces, aplicando la aproximación de elemento finito y para la discretización en el tiempo, un esquema semi-implícito de Euler para el problema primal (6.63) y un esquema  $\theta$  para el problema mixto (6.64), obtenemos para  $n = 1, 2, \dots, N_\tau$ :

### 6.7.2 Aproximación primal completamente discreta

La aproximación primal completamente discreta de elemento finito, usando un esquema semi-implícito de Euler para la discretización en el tiempo es la siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } \boldsymbol{\alpha}(t_{n+1}) \in K^{m_h}(t_{n+1}), \text{ con } \boldsymbol{\alpha}(t_0) = \boldsymbol{\alpha}_0 \in K^{m_h}(t_0) : \\ \mathbf{M}\boldsymbol{\alpha}(t_{n+1}) \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t_{n+1})\} + \tau\Phi_h(t_{n+1}; \boldsymbol{\beta}) - \tau\Phi_h(t_{n+1}; \boldsymbol{\alpha}(t_{n+1})) \\ + \tau\Psi_{C_h}(t_{n+1}; \boldsymbol{\beta}) - \tau\Psi_{C_h}(t_{n+1}; \boldsymbol{\alpha}(t_{n+1})) \geq \{\mathbf{M} - \tau(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_n))\} \boldsymbol{\alpha}(t_n) \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t_{n+1})\} \\ + \tau\{\mathbf{f}(t_n) - \mathbf{g}(t_n)\} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t_{n+1})\}, \forall \boldsymbol{\beta} \in K^{m_h}(t_{n+1}) \end{array} \right. \quad (6.71)$$

### 6.7.3 Aproximación mixta completamente discreta

La aproximación completamente discreta de elemento finito, usando un esquema  $\theta$  para la discretización en el tiempo, para el problema mixto, es la siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (\boldsymbol{\alpha}(t_{n+1}), \boldsymbol{\lambda}^*(t_{n+1}), \boldsymbol{\mu}^*(t_{n+1})) \in K_{\tilde{u}_h}^{m_h}(t_{n+1}) \times C_I^{r_h}(t_{n+1}) \times C_B^{r_h}(t_{n+1}), \\ \text{con } \boldsymbol{\alpha}(t_0) = \boldsymbol{\alpha}_0 \in K_{\tilde{u}_h}^{m_h}(t_0), \text{ y} \\ \tilde{\Phi}_h^*(t_0; \boldsymbol{\eta}^*) - \tilde{\Phi}_h^*(t_0; \boldsymbol{\lambda}^*(t_0)) \geq \mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}_0 \cdot \{\boldsymbol{\eta}^* - \boldsymbol{\lambda}^*(t_0)\}, \quad \forall \boldsymbol{\eta}^*(t) \in C_I^{r_h}(t_0), \\ \tilde{\Psi}_{C_h}^*(t_0; \boldsymbol{\nu}^*) - \tilde{\Psi}_{C_h}^*(t_0; \boldsymbol{\mu}^*(t_0)) \geq \mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}_0 \cdot \{\boldsymbol{\nu}^* - \boldsymbol{\mu}^*(t_0)\}, \quad \forall \boldsymbol{\nu}^*(t) \in C_B^{r_h}(t_0), \text{ tal que :} \\ \{\mathbf{M} - \tau\theta(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_{n+1}))\} \boldsymbol{\alpha}(t_{n+1}) \cdot \boldsymbol{\beta} = \{\mathbf{M} - \tau(1 - \theta)(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_n))\} \boldsymbol{\alpha}(t_n) \cdot \boldsymbol{\beta} \\ + \tau(1 - \theta) \{\mathbf{f}(t_n) - \mathbf{g}(t_n) - \mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}^*(t_n) - \mathbf{D}^T \boldsymbol{\mu}^*(t_n)\} \cdot \boldsymbol{\beta} \\ + \tau\theta \{\mathbf{f}(t_{n+1}) - \mathbf{g}(t_{n+1}) - \mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}^*(t_{n+1}) - \mathbf{D}^T \boldsymbol{\mu}^*(t_{n+1})\} \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K_0^{m_h}, \\ \tilde{\Phi}_h^*(t_{n+1}; \boldsymbol{\eta}^*) - \tilde{\Phi}_h^*(t_{n+1}; \boldsymbol{\lambda}^*(t_{n+1})) \geq \mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}(t_{n+1}) \cdot \{\boldsymbol{\eta}^* - \boldsymbol{\lambda}^*(t_{n+1})\}, \quad \forall \boldsymbol{\eta}^* \in C_I^{r_h}(t_{n+1}), \\ \tilde{\Psi}_{C_h}^*(t_{n+1}; \boldsymbol{\nu}^*) - \tilde{\Psi}_{C_h}^*(t_{n+1}; \boldsymbol{\mu}^*(t_{n+1})) \geq \mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}(t_{n+1}) \cdot \{\boldsymbol{\nu}^* - \boldsymbol{\mu}^*(t_{n+1})\}, \quad \forall \boldsymbol{\nu}^*(t) \in C_B^{r_h}(t_{n+1}) \end{array} \right. \quad (6.72)$$

donde  $N_\tau$  denota el número de pasos del tiempo,  $\tau = \frac{T}{N_\tau}$  el paso del tiempo,  $t_n = nt$  y  $\theta \in [0, 1]$ ,  $\mathbf{A}$ ,  $\Phi_h$ ,  $\Psi_{C_h}^*$ ,  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\tilde{\Phi}_h^*$  y  $\tilde{\Psi}_{C_h}^*$ ,  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{f}$  y  $\mathbf{g}$  coinciden con la definición estandard (6.65).

## 6.8 El esquema semi-implícito de Euler como un algoritmo ALG 0

Siguiendo el método discutido en el capítulo anterior los algoritmos tipo Uzawa para el problema primal y mixto discretos, con métodos de resolventes de Gabay [27, 29], caracterizaremos el esquema primal semi-implícito de Euler como un algoritmo ALG 0.

Expresando el esquema semi-implícito de Euler (6.71) en forma subdiferencial:

$$\{\mathbf{M} - \tau(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_n))\} \boldsymbol{\alpha}(t_n) + t\mathbf{q}(t_n) \in \{\mathbf{M} + \tau\partial\Lambda_h(t_{n+1})\} \boldsymbol{\alpha}(t_{n+1}), \quad (6.77)$$

donde:

$$\mathbf{q}(t_n) = \mathbf{f}(t_n) - \mathbf{g}(t_n) \quad (6.78)$$

$$\Lambda_h(t_{n+1}) = \Phi_h(t_{n+1}) + \Psi_{Ch}(t_{n+1}) + I_{K_{\hat{u}_h}^{m_h}(t)}.$$

Sea  $J_{\mathbf{M}, \partial\Lambda_h(t_{n+1})}^\tau$  el operador resolvente del subdiferencial  $\partial\Lambda_h(t_{n+1})$ , el cual es una contracción firme univaluada:

$$J_{\mathbf{M}, \partial\Lambda_h(t_{n+1})}^\tau = \{\mathbf{M} + \tau\partial\Lambda_h(t_{n+1})\}^{-1} \quad (6.79)$$

entonces:

$$\boldsymbol{\alpha}(t_{n+1}) = J_{\mathbf{M}, \partial\Lambda_h(t_{n+1})}^\tau(\{\mathbf{M} - \tau(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_n))\} \boldsymbol{\alpha}(t_n) + t\mathbf{q}(t_n)). \quad (6.80)$$

Identificamos el operador resolvente como una gráfica de proximidad:

*Lemma 6.1* El operador  $\mathbf{M}$  - resolvente es caracterizado por la gráfica de  $\mathbf{M}$  - proximidad relativa al funcional  $\tau\Lambda_h(t_{n+1})$  :

$$J_{\mathbf{M}, \partial\Lambda_h(t_{n+1})}^\tau(z) = \text{Pr } \text{ox}_{\mathbf{M}, \partial\Lambda_h(t_{n+1})}^\tau(z) \equiv \arg\left(\inf_{y \in D(\tau\Lambda_h(t_{n+1}))} \left\{ \frac{1}{2} \|y - \mathbf{M}^{-1}z\|_{\mathbf{M}}^2 + \tau\Lambda_h(t_{n+1}; y) \right\}\right), \quad (6.81)$$

*Prueba* : Sea  $\|\cdot\|_{\mathbf{M}}$  la norma inducida por el producto escalar  $(\mathbf{M}\cdot, \cdot)$ . Entonces de (5.42) y (5.43), considerando  $x = J_{\mathbf{M}, \partial\Lambda_h(t_{n+1})}^\tau(z)$  es equivalente a  $0 \in \mathbf{M}x - z + \partial(\tau\Lambda_h(t_{n+1}))(x)$ , con lo cual obtenemos (6.81).  $\square$



Entonces si las condiciones de estabilidad del *Teorema 6.5* se cumplen el esquema semi-implícito de Euler coincide con el algoritmo de punto próximo:

*Algoritmo ALG<sub>0M</sub>* :

Dado  $\alpha^0 \in K^{m_h}$ , y conocido  $\alpha^n \in K^{m_h}$ , calcular  $\alpha^{n+1} \in K^{m_h}$  tal que :

$$\alpha(t_{n+1}) = \text{Pr } ox_{\mathbf{M}, \tau\Phi_h + \tau\Psi_{C_h} + \tau I_{K_{\hat{u}_h}^{m_h}(t_{n+1})}}(\{\mathbf{M} - \tau(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_n))\} \alpha(t_n) + \tau(f - g)(t_n)), \quad n \geq 1. \quad (6.82)$$

Este algoritmo es a la vez un algoritmo de punto próximo del problema estacionario.

*Teorema 6.6* Si las condiciones del *Teorema 6.4* son válidas, entonces el algoritmo de punto próximo del esquema primal semi-implícito de Euler:

*Algoritmo ALG<sub>0M</sub>* :

$$\alpha_\infty^{n+1} = \text{Pr } ox_{\mathbf{M}, \tau\Phi_h + \tau\Psi_{C_h} + \tau I_{K_{\hat{u}_h}^{m_h}}}(\{\mathbf{M} - \tau(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_n))\} \alpha(t_n) + \tau(f - g)(t_n)), \quad n \geq 1.$$

con  $\alpha_\infty^0 = \alpha_0 \in K^{m_h}$

(6.83)

es a la vez un algoritmo de punto próximo del problema estacionario:

Encontrar  $\alpha_\infty \in K^{m_h}$  tal que :

$$\{\mathbf{A} + \mathbf{B}\} \alpha_\infty \cdot \{\beta - \alpha_\infty\} + \phi_h(\beta) - \phi_h(\alpha_\infty) + \psi_{C_h}(\beta) - \psi_{C_h}(\alpha_\infty) \geq \{f - \mathbf{g}\} \cdot \{\beta - \alpha_\infty\},$$

$$\forall \beta \in K^{m_h}$$

(6.84)

*Prueba* : Multiplicando (6.84) por  $\tau > 0$  y sumando el término cero  $\mathbf{M}\alpha_\infty - \mathbf{M}\alpha_\infty$  obtenemos:

$$\alpha_\infty = \text{Pr } ox_{\mathbf{M}, \tau\Phi_h + \tau\Psi_{C_h} + \tau I_{K_{\hat{u}_h}^{m_h}}}(\{\mathbf{M} - \tau(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_n))\} \alpha_\infty + \tau(f - g)), \quad (6.85)$$

de la cual (6.83) es un algoritmo de punto próximo.  $\square$

Observamos que con la matriz de masa  $\mathbf{M}$  igual a la identidad el algoritmo *ALG<sub>0M</sub>* corresponde al método resolvente primal aplicado al problema de control de difusión advección estacionario, y al cual el teorema general de convergencia, *Teorema 6.1* de Gabay [27], se aplica directamente.

## 6.9 Un método iterativo de solución para el problema discreto mixto, algoritmo ALG 4

De acuerdo con la interpretación proximal de las desigualdades variacionales mixtas semidiscretas:

$$\lambda^*(t) = \text{Pr } ox_{\rho\tilde{\Phi}^*}(\lambda^*(t) + \rho\mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}(t)), \quad (6.85)$$

$$\boldsymbol{\mu}^*(t) = \text{Pr } ox_{\rho\tilde{\Psi}_c^*}(\boldsymbol{\mu}^*(t) + \rho\mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}(t)).$$

introducimos de manera natural el algoritmo iterativo de tipo Uzawa para el modelo mixto totalmente discreto:

*Algoritmo ALG4:*

Con  $(\boldsymbol{\alpha}(t_0), \boldsymbol{\lambda}^*(t_0), \boldsymbol{\mu}^*(t_0)) \in K_{\tilde{u}_h}^{m_h}(t_0) \times C_I^{r_h}(t_0) \times C_B^{r_h}(t_0)$  tal que :  
 $\boldsymbol{\alpha}(t_0) = \boldsymbol{\alpha}_0$ ,  $C\boldsymbol{\alpha}_0 \in \partial\tilde{\Phi}_h^*(t; \boldsymbol{\lambda}^*(t_0))$ ,  $\mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}_0 \in \tilde{\Psi}_{C_h}^*(t; \boldsymbol{\mu}^*(t_0))$ ,

dados  $(\boldsymbol{\alpha}(t_n), \boldsymbol{\lambda}^*(t_n), \boldsymbol{\mu}^*(t_n)) \in K_{\tilde{u}_h}^{m_h}(t_n) \times C_I^{r_h}(t_n) \times C_B^{r_h}(t_n)$ , y  
 $\boldsymbol{\lambda}_1^*(t_{n+1}), \boldsymbol{\mu}_1^*(t_{n+1}) \in C_I^{r_h}(t_{n+1}) \times C_B^{r_h}(t_{n+1})$ , una vez que:  
 $\boldsymbol{\lambda}_m^*(t_{n+1}), \boldsymbol{\mu}_m^*(t_{n+1}) \in C_I^{r_h}(t_{n+1}) \times C_B^{r_h}(t_{n+1})$ ,  $m \geq 1$  son conocidos, .

*Calcular :*

$\boldsymbol{\alpha}^m(t_{n+1}) \in K_{\tilde{u}_h}^{m_h}(t_{n+1})$  y entonces  $\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^*(t_{n+1}), \boldsymbol{\mu}_{m+1}^*(t_{n+1}) \in C_I^{r_h}(t_{n+1}) \times C_B^{r_h}(t_{n+1})$ , por :

$$\{\mathbf{M} - \tau\theta(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_{n+1}))\} \boldsymbol{\alpha}(t_{n+1}) \cdot \boldsymbol{\beta} = \{\mathbf{M} - \tau(1 - \theta)(\mathbf{A} + \mathbf{B}(t_n))\} \boldsymbol{\alpha}(t_n) \cdot \boldsymbol{\beta}$$

$$+ \tau(1 - \theta) \{\mathbf{f}(t_n) - \mathbf{g}(t_n) - \mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}^*(t_n) - \mathbf{D}^T \boldsymbol{\mu}^*(t_n)\} \cdot \boldsymbol{\beta}$$

$$+ \tau\theta \{\mathbf{f}(t_{n+1}) - \mathbf{g}(t_{n+1}) - \mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}_m^*(t_{n+1}) - \mathbf{D}^T \boldsymbol{\mu}_m^*(t_{n+1})\} \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K_0^{m_h},$$

$$\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^*(t_{n+1}) = \text{Pr } ox_{\rho\tilde{\Phi}^*}(t_{n+1})(\boldsymbol{\lambda}_m^*(t_{n+1}) + \rho\mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}^m(t_{n+1})),$$

$$\boldsymbol{\mu}_{m+1}^*(t_{n+1}) = \text{Pr } ox_{\rho\tilde{\Psi}_{C_h}^*}(\boldsymbol{\mu}_m^*(t_{n+1}) + \rho\mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}^m(t_{n+1})).$$

(6.87)

Para propósitos de aplicación de las ecuaciones de proximidad anteriores las expresamos en términos de los funcionales primales  $\tilde{\Phi}_h(t_{n+1}) : R^{r_h} \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  y  $\tilde{\Psi}_{C_h}(t_{n+1}) : R^{s_h} \rightarrow R \cup \{+\infty\}$  como:

$$\begin{aligned}\lambda_{m+1}^*(t_{n+1}) &= \left\{ I - \text{Prox}_{\rho(\bar{\phi}(t_{n+1}) \circ (\frac{1}{\rho}I))}(\lambda_m^*(t_{n+1}) + \rho \mathbf{C}\alpha^m(t_{n+1})) \right\}, \\ \mu_{m+1}^*(t_{n+1}) &= \left\{ I - \text{Prox}_{\rho(\bar{\psi}_{C_h}(t_{n+1}) \circ (\frac{1}{\rho}I))}(\mu_m^*(t_{n+1}) + \rho \mathbf{D}\alpha^m(t_{n+1})) \right\}.\end{aligned}\tag{6.88}$$

para esto usamos el siguiente resultado:

*Lemma 6.2* Sea  $\Lambda$  un funcional convexo propio, con conjugado  $\Lambda^*$ , entonces la gráfica de proximidad  $\text{Prox}_{\rho\Lambda^*}$  es :

$$\text{Prox}_{\rho\Lambda^*} = I - \text{Prox}_{\rho(\Lambda \circ \frac{1}{\rho}I)}.\tag{6.89}$$

*Prueba* De la relación (6.81):

$$\text{Prox}_{\rho\Lambda^*} = J_{\partial\Lambda^*}^{\rho} \equiv (I - \rho\partial\Lambda^*)^{-1}, \quad \rho > 0\tag{6.90}$$

Entonces, para  $x^* = \text{Prox}_{\rho\Lambda^*}(z^*)$ , tenemos que  $z^* \in (I + \partial(\rho\Lambda^*))(x^*)$  o equivalentemente,  $z^* - x^* \in \partial(\rho\Lambda^*)(x^*)$ . Aplicando la identidad de Fenchel,  $x^* \in \{\partial(\rho\Lambda^*)\}^*(z^* - x^*)$  y entonces  $z^* \in \{I + \partial(\rho\Lambda^*)^*\}(z^* - x^*)$ .

Por consiguiente  $\text{Prox}_{\rho\Lambda^*} = \{I + \partial(\rho\Lambda^*)^*\}^{-1}$ , pero  $(\rho\Lambda^*)^* = \rho\Lambda \circ \frac{1}{\rho}I$ , de donde obtenemos (6.89).  $\square$

## Capítulo 7

# MODELO DE FLUJO MISCIBLE, MACROHÍBRIDO, EVOLUTIVO, CON CONTROL DE CONTAMINANTES EN ACUÍFEROS

### 7.1 Introducción

En este capítulo integraremos en un modelo de flujo miscible dependiente del tiempo, con control de contaminantes, en un medio poroso, directamente aplicable a acuíferos, lo estudiado en el Capítulo 2, de Flujo en Medios Porosos, con lo estudiado en los Capítulos 3 , 4, 5 y 6, sobre Flujo de Contaminantes y sobre Control.

En este modelo consideramos el flujo de un fluido en medios porosos sobre el cual se agrega un contaminante, cuya concentración no altera significativamente el flujo, la densidad, la presión y la velocidad del fluido varían solamente por la presencia del contaminante y se actualizan en cada paso del tiempo. En el modelo se considera que la advección del contaminante por el fluido puede llegar a ser dominante, lo que se incorpora por el hecho que la norma  $\|D \cdot gradu\|_{W^{1,\infty}} \rightarrow 0$  cuando la advección es dominante.

Para lograr el control sobre este sistema se imponen restricciones en la concentración de contaminantes en el interior del dominio del problema, lo que nos lleva a acciones de control sobre el interior (control en el interior) y sobre parte de la frontera (control en la frontera) del dominio del problema.

Para introducir las restricciones y las acciones de control y obtener las correspondiente desigualdades variacionales locales, aplicaremos la metodología de subdiferenciales ya mencionadas en los capítulos anteriores. Este modelo de flujo miscible con control de contaminantes es dependiente del tiempo en la parte de difusión y advección de contaminantes y por acoplamiento, en cada paso del tiempo, en el flujo en medio poroso.

Para considerar la heterogeneidad y anisotropía de las propiedades físicas así como la gran escala espacial de un acuífero real y la exactitud requerida en la aproximación de los campos de velocidad, presión y concentración, se hace indispensable la macrohibridización o descomposición de dominios del problema. El sistema es descompuesto en varios subsistemas que interactúan y se sincronizan a través de sus

fronteras internas ó interfaces. Esto se logra mediante la continuidad en las condiciones de transmisión de los campos de velocidad, presión y concentración y sus respectivos flujos. Cada subsistema contiene un problema mas pequeño ó más simple de resolver que el problema original. Además, ésto nos conduce a aprovechar de manera natural el cómputo en paralelo o en sistemas distribuídos que se desarrolla actualmente.

Una vez obtenidas las formulaciones variacionales macrohíbridas, mixta para el flujo, primal y mixta dual para la difusión y transporte del flujo miscible con control de contaminantes, estableceremos la aproximación abstracta interna semidiscreta de elemento finito, no necesariamente conforme.

Con las formulaciones macrohíbridas, de elemento finito, mixta-primal y mixta-dual del problema de desplazamiento miscible con control de contaminantes, estamos en la posibilidad de aplicar la teoría de resolventes para desigualdades variacionales y generar algoritmos de penalidad dualizada, introduciendo operadores de proximidad o de punto próximo. Para la evolución en el tiempo de problemas mixtos esto corresponde a esquemas de integración numérica en el tiempo, específicamente del tipo Euler, Douglas Rachford y Peaceman Rachford.

## 7.2 Modelo de flujo miscible con control de contaminantes

Consideremos un dominio  $\Omega \subset R^n$ ,  $n = 1, 2, 3$ , con frontera lisa a trozos, dentro de un medio poroso, como por ejemplo un acuífero, (ver Cap. 2), dentro del cual fluye un fluido que cumple con la Ley de Darcy y la conservación de la masa, consideramos que el fluido es incompresible. Sobre este fluido en movimiento en un medio poroso se adiciona, ya sea por la acción del hombre o de manera natural, un contaminante que puede mezclarse con el fluido, es decir una sustancia que se disuelve o dispersa en el fluido y que además es arrastrada por éste. Si se cumplen las hipótesis dadas en el Capítulo 3, la difusión del contáminante cumple con la Ley de Fick y la conservación de la masa, entonces el sistema de ecuaciones diferenciales parciales que gobiernan el transporte y difusión de contaminantes en un fluido en medios porosos son:

Encontrar  $\mathbf{w}$ ,  $p$ ,  $u$  en  $\Omega \times (0, T)$ , tal que :

Ecuaciones de velocidad presión

$$\begin{aligned}\mu \mathbf{K}^{-1} \mathbf{w} &= -\text{grad } p + \rho \mathbf{g} \\ \text{div } \mathbf{w} &= q\end{aligned}$$

Ecuación de concentración

(7.1)

$$\phi \frac{\partial u}{\partial t} - \text{div}(\mathbf{D} \text{grad } u) + \mathbf{w} \cdot \text{grad } u + qu = f$$

Con las condiciones de frontera :

$$\mathbf{w} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \hat{w}_n \text{ en } \partial\Omega_N$$

$$p = \hat{p} \text{ en } \partial\Omega_D$$

$$\gamma u = \hat{u} \in \partial\Omega_D$$

$$-D \text{grad } u \cdot \mathbf{n} = \hat{w}_n \in \partial\Omega_N$$

Y la condición inicial :

$$u(0) = \hat{u}_0 \in \Omega$$

Aquí  $\mathbf{w}$ ,  $p$ , y  $u$  denotan los campos de velocidad, presión y concentración.  $\mu$ ,  $\rho$  y  $\phi$  las propiedades físicas del fluido y el medio: viscosidad, densidad y porosidad,  $\mathbf{g}$  es el vector aceleración de la gravedad.  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{D}$  son los tensores de permeabilidad y de difusión dispersión, la norma  $\|\mathbf{D} \cdot \text{grad } u\|_{W^{1,\infty}} \rightarrow 0$  cuando la advección es dominante,  $q$  y  $f$  fuentes de fluido y contaminante respectivamente.

El término  $qu = p^* = -\frac{\partial u}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{D} \text{grad } u) - \mathbf{w} \cdot \text{grad } u + f$  denota fuentes o sumideros de fluido con contaminante, los cuales nos sirven como medio de control interno y corresponden al campo dual del modelo mixto.

Adicionalmente establecemos sobre el sistema dos restricciones para obtener las correspondientes acciones de control:

1°.- Queremos que la concentración de contaminantes, en cada punto del acuífero y en cada tiempo, este comprendida entre los valores,  $c_1$  y  $c_2$ , es decir:  $0 \leq c_1 < u(x, t) < c_2$ ,  $x \in \Omega$ ,  $t \in (0, T)$ .

2.-Que la concentración, o el flujo de contaminantes este en un rango prefijado en una parte de la frontera, es decir control en la frontera.

Consideraremos las condiciones de frontera Dirichlet y Newman, de manera generalizada, como restricciones y acciones de control complementarias entre sí, modeladas mediante ecuaciones subdiferenciales.

### 7.3 Formulación variacional macrohíbrida del problema de flujo miscible con control de contaminantes

Para obtener la formulación variacional macrohíbrida del problema de flujo miscible con control de contaminantes en acuíferos, primero dividimos el dominio en varios subdominios. Para cada subdominio, de acuerdo con el método que hemos seguido en los capítulos 2, 5 y 6, obtenemos la formulación variacional punto a punto del problema (7.1), en base a subdiferenciales internos, de frontera y de sus duales, obtenidos en base a la gráfica inversa. Las condiciones de transmisión entre las interfaces, o fronteras internas, de los subdominios las modelamos mediante ecuaciones subdiferenciales. De la definición de subdiferencial obtenemos las desigualdades variacionales correspondientes. Integrando y usando la fórmula de Green adecuada, obtenemos las formulaciones variacionales globales mixta para el flujo y primal y mixta para el transporte y difusión de contaminantes.

#### 7.3.1 Descomposición de dominios

Primero introducimos la descomposición del dominio  $\Omega$  del problema en subdominios que no se sobreponen:

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{e=1}^E \bar{\Omega}_e, \quad \text{con } \Omega_e \cap \Omega_f = \emptyset, \quad 1 \leq e < f \leq E, \quad (7.2)$$

con fronteras internas e interfaces:

$$\begin{aligned} \Gamma_e &= \partial\Omega_e \cap \Omega, & 1 \leq e \leq E, \\ \Gamma_{ef} &= \Gamma_e \cap \Gamma_f, & 1 \leq e < f \leq E. \end{aligned} \quad (7.3)$$

#### 7.3.2 Formulación variacional macrohíbrida mixta (velocidad-presión) del problema de flujo

El problema de flujo es transformado en un conjunto de subproblemas locales, para  $e = 1, 2, \dots, E$  tenemos:

$$\begin{aligned}
 \mu \mathbf{K}_e^{-1} \mathbf{w}_e &= -\text{grad} p_e + \rho_e \mathbf{g}, \\
 \text{div} \mathbf{w}_e &= q_e, \quad \text{en } \Omega_e, \\
 \mathbf{w}_e \cdot \hat{\mathbf{n}}_e &= \hat{w}_{n_e} \text{ en } \partial\Omega_{N_e}, \\
 p_e &= \hat{p}_e \text{ en } \partial\Omega_{D_e}
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

los que interactúan a través de sus interfaces, de acuerdo a las condiciones de transmisión, ó sincronización, las cuales imponen restricciones de continuidad en los campos de velocidad y presión:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{w}_e \cdot \hat{\mathbf{n}}_e &= -\mathbf{w}_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f \\
 p_e &= p_f, \quad \text{sobre } \Gamma_{ef}, \quad 1 \leq e < f \leq E.
 \end{aligned} \tag{7.5}$$

Para formular variacionalmente los problemas locales de de flujo y aproximar mediante subdiferenciales las condiciones de sincronización (7.5), introducimos los espacios funcionales locales mixtos, para  $e = 1, 2, \dots, E$ , sean  $V(\Omega_e) = H(\text{div}; \Omega_e) = \{\mathbf{v} \in L^2(\Omega_e) : \text{div} \mathbf{v} \in L^2(\Omega_e), \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e \in L^2(\partial\Omega_e)\}$  y  $Y(\Omega_e) = L^2(\Omega_e)$  campos de velocidad y presión. Y correspondiendo a las fronteras internas los espacios de trazas de presión y velocidad normal los espacios comunes  $B_w(\Gamma_e) = H^{-1/2}(\Gamma_e)$  y su dual  $B_w^*(\Gamma_e) = H^{1/2}(\Gamma_e)$ , las condiciones de transmisión (7.5) son formuladas como:

$$\begin{aligned}
 \{\mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}\} &\in Q_{D_w} = \left\{ \{w_{n_e}\} \in \prod_{e=1}^E B_w(\Gamma_e) : w_{n_e} = -w_{n_f}, \quad \text{en } \Gamma_{ef} \right\} \\
 \{p_e\} &\in Q_{N_w}^* = \left\{ \{q_e\} \in \prod_{e=1}^E B_w^*(\Gamma_e) : q_e = q_f, \quad \text{en } \Gamma_{ef} \right\}
 \end{aligned} \tag{7.6}$$

Las condiciones de transmisión de continuidad (7.6) son caracterizadas variacionalmente por las ecuaciones subdiferenciales monótonas primales y duales:

$$\{p_e\} \in \partial I_{Q_{D_w}}(\{\mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}\}) \Leftrightarrow \{\mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}\} \in \partial I_{Q_{N_w}^*}(\{p_e\}) \tag{7.7}$$



Introducimos el campo dual de presión de frontera interna:

$$r_e = p_e, \quad \text{en } \Gamma_e, \quad 1 \leq e \leq E. \quad (7.8)$$

Entonces, la formulación variacional macrohíbrida del problema mixto de flujo, con las condiciones de transmisión (7.5) dualizadas mediante (7.7) es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar, para } e = 1, 2, \dots, E, (\mathbf{w}_e, p_e) \in V(\Omega_e) \times Y(\Omega_e) : \\ \int_{\Omega_e} \mu_e k^{-1} \mathbf{w}_e \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{w}_e) d\Omega + \int_{\partial\Omega_e \setminus \Gamma_e} \psi_{w_e} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e) d\partial\Omega \geq \int_{\partial\Omega_e \setminus \Gamma_e} \psi_{w_e} (\mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e) d\partial\Omega \\ + \int_{\Omega_e} p_e (\text{div } \mathbf{v} - \text{div } \mathbf{w}_e) d\Omega + \int_{\Omega_e} \rho_e \mathbf{g} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{w}_e) d\Omega - \int_{\Gamma_e} r_e (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e - \mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e) d\Gamma, \forall \mathbf{v} \in V(\Omega_e), \\ - \int_{\Omega_e} \text{div } \mathbf{w}_e q d\Omega = - \int_{\Omega_e} \hat{q}_e q d\Omega, \quad \forall q \in Y(\Omega_e), \\ \text{Con } r_e \in Q_{N_w}^* \text{ satisfaciendo las condiciones de transmisión :} \\ 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e (s_e - r_e) d\Gamma, \quad \forall \{s_e\} \in Q_{N_w}^*. \end{array} \right. \quad (7.9)$$

### 7.3.3 Formulaciones variacionales macrohíbridas del problema de control de difusión y advección de contaminantes

Reformulando el problema de control de difusión y advección de contaminantes de (7.1) localmente en cada subdominio  $\Omega_e$ ,  $1 \leq e \leq E$ , con condiciones de frontera y de control correspondientes sobre  $\partial\Omega_B^e = \partial\Omega_e \cap \partial\Omega_B$ ,  $B \in \{D, N, C\}$ , obtenemos un conjunto de subproblemas mixtos o primales, sincronizados vía condiciones de transmisión puntuales Dirichlet y Newman a través de sus interfaces:

$$\begin{aligned} u_e(x) &= u_f(x) \\ -\mathbf{D} \text{grad } u_e(x) \cdot \mathbf{n}_e(x) &= \mathbf{D} \text{grad } u_f(x) \cdot \mathbf{n}_f(x), \quad x \in \Gamma_{ef}. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Para formular variacionalmente las condiciones de transmisión (7,10) primero los expresamos en el marco de referencia funcional del problema. Introducimos los campos funcionales, para  $e = 1, 2, \dots, E$ , sean  $V(\Omega_e) = H^1(\Omega_e)$ , los espacios de Hilbert locales correspondientes, con espacio pivote  $H(\Omega_e) = L^2(\Omega_e)$  y sean  $B(\Gamma_e) = H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_e)$  y su dual  $B^*(\Gamma_e) = H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_e)$  los espacios de frontera interna Dirichlet y Neumann con operadores traza  $\gamma_e \in \mathfrak{L}(V(\Omega_e), B(\Gamma_e))$  y  $\delta_e : V(\Omega_e) \rightarrow B^*(\Gamma_e)$ . Entonces las

condiciones de transmisión formales (7.10), para los campos primales descompuestos  $\{u_e\}$  son:

$$\begin{aligned} \{\gamma_e u_e\} \in Q_{D_C} &= \left\{ \{q_e\} \in \prod_{e=1}^E B(\Gamma_e) : q_e = q_f \text{ sobre } \Gamma_{ef}, 1 \leq e < f \leq E \right\}, \\ -\{\delta_e(u_e)\} &= \{-\mathbf{D} \text{grad } u_e \cdot \mathbf{n}_e\} \in Q_{N_C}^* = \left\{ \begin{array}{l} \{q_e^*\} \in \prod_{e=1}^E B^*(\Gamma_e) : \\ q_e^* = q_f^* \text{ en } \Gamma_{ef}, 1 \leq e < f \leq E \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (7.11)$$

donde  $Q_{D_C}$  y  $Q_{N_C}^*$  son los subespacios de transmisión admisibles. Las condiciones de transmisión son caracterizadas variacionalmente por las ecuaciones subdiferenciales primal y dual equivalentes:

$$-\{\delta_e(u_e)\} \in \partial I_{Q_{D_C}}(\{\gamma_e u_e\}) \Leftrightarrow \{\gamma_e u_e\} \in \partial I_{Q_{N_C}^*}(-\{\delta_e(u_e)\}), \quad (7.12)$$

donde  $I_{Q_{D_C}}$  y  $I_{Q_{N_C}^*}$  son los funcionales indicatrices de los campos de admisibilidad Dirichlet y Neumann  $Q_{D_C}$  y  $Q_{N_C}^*$  respectivamente.

Entonces, introduciendo el campo dual de frontera interna Neumann

$$\lambda_e^*(x) \equiv -\delta_e(u_e(x)) = -\mathbf{D}(x) \text{grad } u_e(x) \cdot \mathbf{n}_e(x), \quad x \in \Gamma_e, 1 \leq e \leq E, \quad (7.13)$$

obtenemos las formulaciones variacionales macrohíbridas puntuales, primal y dual, del problema de control de difusión y advección de contaminantes, y de sus condiciones de transmisión.

Integrando por partes y mediante la función de Green apropiada, obtenemos las formulaciones variacionales macrohíbridas mixta primal y mixta dual del problema de control de difusión y advección de contaminantes.

## 7.3.4 Formulación variacional macrohíbrida mixta primal del problema de control de difusión y advección del contaminantes

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Encontrar } u \in \mathfrak{U}, \text{ con } u(0) = u_0 \in K(0) \text{ y } t \in (0, T), u(t) \in K(t) : \\
 \int_{\Omega_e} \phi_e \frac{\partial u_e(t)}{\partial t} \{v(t) - u_e(t)\} d\Omega + \int_{\Omega_e} (D_e(x) \text{ gradu}_e(t)) \{\text{grad}v(t) - \text{grad}u_e(t)\} d\Omega \\
 + \int_{\Omega_e} \mathbf{w}_e(t) \cdot \text{grad}u_e(t) \{v(t) - u_e(t)\} d\Omega + \int_{\Omega_e} \phi_e(t; v_e(t)) d\Omega - \int_{\Omega_e} \phi_e(t; u_e(t)) d\Omega \\
 + \int_{\Omega_{C_e}} \psi_{C_e}(t; \gamma v(t)) d\partial\Omega - \int_{\Omega_C} \psi_{C_e}(t; \gamma u_e(t)) d\partial\Omega \\
 \geq \int_{\Omega_e} f_e(t) \{v(t) - u_e(t)\} d\Omega - \int_{\Omega_{N_e}} g_e(t) \{\gamma v(t) - \gamma u_e(t)\} d\partial\Omega, \quad \forall v(t) \in V(\Omega_e), \\
 \text{y } \{\lambda_e^*\} \in Q_{N_C}^* \text{ satisfaciendo las condiciones de transmisión :} \\
 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \gamma_e u_e(\mu_e^* - \lambda_e^*) d\Gamma, \quad \forall \mu_e^* \in Q_{N_C}^*
 \end{array} \right.$$

## 7.3.5 Formulación variacional macrohíbrida mixta dual del problema de control de difusión y advección del contaminantes

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Para } e = 1, 2, \dots, E, \text{ encontrar } (u, p^*, s^*) \in \mathfrak{U} \times L^2(Q) \times L^2(\Sigma_C) \text{ con } u(0) \in K_{\hat{u}(0)} \\
 \text{y para toda } t \in (0, T), (u(t), p^*(t), s^*(t)) \in K_{\hat{u}(t)} \times C_I(t) \times C_B(t) : \\
 \int_{\Omega_e} \phi_e \frac{\partial u_e(t)}{\partial t} \{v(t) - u_e(t)\} d\Omega + \int_{\Omega_e} (\mathbf{D}(x) \text{ gradu}_e(t)) \{\text{grad}v(t) - \text{grad}u_e(t)\} d\Omega \\
 + \int_{\Omega} w(t) \cdot \text{grad}u_e(t) \{v(t) - u_e(t)\} d\Omega \geq \int_{\Omega_e} \{f_e(t) - p_e^*(t)\} \{v(t) - u_e(t)\} d\Omega \\
 - \int_{\partial\Omega_{N_e}} g_e^*(t) \{\gamma v(t) - \gamma u_e(t)\} d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_C} \lambda_e^*(t) \{\gamma v(t) - \gamma u_e(t)\} d\partial\Omega, \quad \forall v(t) \in K_{\hat{u}_e(t)}, \\
 \int_{\Omega_e} \phi^*(t; q^*(t)) d\Omega - \int_{\Omega} \phi^*(t; p_e^*(t)) d\Omega \geq \int_{\Omega} u_e(t) \{q^*(t) - p_e^*(t)\} d\Omega, \quad \forall q^*(t) \in C_{I_e}(t), \\
 \int_{\partial\Omega_C^e} \psi_C^*(t; r^*(t)) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega_{C_e}} \psi_C^*(t; s_e^*(t)) d\partial\Omega \\
 \geq \int_{\partial\Omega_{C_e}} \gamma u_e(t) \{r^*(t) - s_e^*(t)\} d\partial\Omega, \quad \forall r^*(t) \in C_{B_e}(t), \\
 \text{con } \{\lambda_e^*\} \in Q_{N_C}^* \text{ satisfaciendo las condiciones de transmisión :} \\
 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \gamma_e u_e(\mu_e^* - \lambda_e^*) d\Gamma, \quad \forall \mu_e^* \in Q_{N_C}^*.
 \end{array} \right. \tag{7.15}$$

## 7.4 Aproximaciones macrohíbridas de elemento finito

En esta sección asociamos a las formulaciones variacionales macrohíbridas de los problemas de flujo y de control de transporte y difusión de contaminantes, modelos espacialmente discretos de aproximaciones de elemento finito. Una característica de esta discretización es que debido a la dualización de las condiciones de transmisión las mallas de elemento finito pueden no coincidir en las interfaces. Entonces, de una manera natural, las aproximaciones de elemento finito pueden ser introducidas independientemente en cada subdominio y en cada frontera interna

### 7.4.1 Aproximación macrohíbrida de elemento finito del problema de difusión y advección de contaminantes

Definimos para cada subproblema  $e = 1, 2, \dots, E$ , aproximaciones de elemento finito del campo primal local  $u_e \in H^1(\Omega_e)$  y los campos duales de control  $f_e^* \in \mathcal{L}(H^1(\Omega_e), R)$  y  $g_e^* \in H^{-1/2}(\partial\Omega_C^e)$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{h_e} &= \sum_{j=1}^{m_{h_e}} \alpha_j^e \chi_j^e \in \mathbf{V}_{h_e} = [\chi_1^e, \chi_2^e, \dots, \chi_{m_{h_e}}^e] \subset H^1(\Omega_e), \\ \mathbf{f}_{h_e}^* &= \sum_{j=1}^{n_{h_e}} \pi_j^{*e} \xi_j^e \in \mathbf{W}_{h_e} = [\xi_1^e, \xi_2^e, \dots, \xi_{n_{h_e}}^e] \subset L^2(\Omega_e) \subset \mathcal{L}(H^1(\Omega_e), R), \\ \mathbf{g}_{h_e}^* &= \sum_{j=1}^{l_{h_e}} \vartheta_j^{*e} \zeta_j^e \in \mathbf{X}_{h_e} = [\zeta_1^e, \zeta_2^e, \dots, \zeta_{l_{h_e}}^e] \subset L^2(\partial\Omega_C^e) \subset H^{-1/2}(\partial\Omega_C^e). \end{aligned} \tag{7.16}$$

Definimos para las condiciones de transmisión en (7.14) y (7.15), aproximaciones de elemento finito para cada flujo de frontera interna  $\lambda_e^* \in H^{-1/2}(\Gamma_e)$ ,  $e = 1, 2, \dots, E$ :

$$\boldsymbol{\lambda}_{h_e}^* = \sum_{j=1}^{r_{h_e}} \lambda_j^{*e} \eta_j^e \in \mathbf{Y}_{h_e} = [\eta_1^e, \eta_2^e, \dots, \eta_{r_{h_e}}^e] \subset L^2(\Gamma_e) \subset H^{-1/2}(\Gamma_e). \tag{7.17}$$

Entonces, asociamos a los problemas macrohíbridos de control de difusión y advección de contaminantes los problemas semidiscretos siguientes.

7.4.2 *Aproximación semidiscreta macrohíbrida mixta primal de elemento finito del problema de control de difusión y advección de contaminantes*

Expresando  $p^* = uq$ ,  $q = \text{div } \mathbf{w}$ , obtenemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } \boldsymbol{\alpha}_e(t) \in K^{m_{he}}(t), \text{ con } \boldsymbol{\alpha}_e(0) = \boldsymbol{\alpha}_{0_e} \in K^{m_{he}}(0) : \\ \\ \left\{ \mathbf{M}_e \frac{d\boldsymbol{\alpha}_e(t)}{dt} + \mathbf{A}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t) + \mathbf{B}(t) \boldsymbol{\alpha}_e(t) + \mathbf{E}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t) \right\} \cdot \{\boldsymbol{\beta}(t) - \boldsymbol{\alpha}_e(t)\} + \Phi(t; \boldsymbol{\beta}(t)) - \Phi(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) \\ + \Psi_C(t; \boldsymbol{\beta}(t)) - \Psi_C(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) \\ \\ \geq -\boldsymbol{\Lambda}_e^T \boldsymbol{\lambda}_e^* \cdot \{\boldsymbol{\beta}(t) - \boldsymbol{\alpha}(t)\} + \{\mathbf{f}(t)\} \cdot \{\boldsymbol{\beta}(t) - \boldsymbol{\alpha}(t)\}, \quad \forall \boldsymbol{\beta}(t) \in K^{m_h}(t). \\ \\ \text{con } \{\boldsymbol{\lambda}_e^*\} \in Q_{N_h}^* \text{ satisfaciendo las condiciones de transmisión :} \\ \\ 0 \geq \sum_{e=1}^E \boldsymbol{\lambda}_e^* \boldsymbol{\alpha}_e(t) \cdot (\boldsymbol{\mu}_e^* - \boldsymbol{\lambda}_e^*), \quad \forall \{\boldsymbol{\mu}_e^*\} \in Q_{N_h}^* \end{array} \right. \quad (7.18)$$

7.4.3 *Aproximación semidiscreta macrohíbrida mixta dual de elemento finito del problema de control de difusión y advección de contaminantes*

Asociamos al problema mixto dual de control de contaminantes macrohíbrido el siguiente problema semidiscreto:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para } e = 1, 2, \dots, E, \text{ y } t \in (0, T) \text{ encontrar } \boldsymbol{\alpha}_e \in K_{\hat{u}_{he}} \text{ y } (\boldsymbol{\pi}_e^*, \boldsymbol{\vartheta}_e^*) \in C_I^{r_h} \times C_B^{s_h} \text{ tal que :} \\ \\ \left\{ \mathbf{M}_e \frac{d\boldsymbol{\alpha}_e(t)}{dt} + \mathbf{A}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t) + \mathbf{B}_e(t) \boldsymbol{\alpha}_e(t) \right\} \cdot (\boldsymbol{\beta}(t) - \boldsymbol{\alpha}_e(t)) \\ \\ \geq \{\mathbf{f}_e(t) - \mathbf{C}_e^T \boldsymbol{\pi}_e^*(t) - \mathbf{D}_e^T \boldsymbol{\vartheta}_e^*(t) - \boldsymbol{\Lambda}_e^T \boldsymbol{\lambda}_e^*\} \cdot (\boldsymbol{\beta}(t) - \boldsymbol{\alpha}_e(t)), \quad \forall \boldsymbol{\beta}(t) \in K_{\hat{u}_{he}} \\ \\ \tilde{\Phi}_{eh}^*(t; \boldsymbol{\eta}^*(t)) - \tilde{\Phi}_{he}^*(t; \boldsymbol{\pi}_e^*(t)) \geq \mathbf{C}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t) \cdot \{\boldsymbol{\rho}^*(t) - \boldsymbol{\pi}_e^*(t)\}, \quad \forall \boldsymbol{\rho}^*(t) \in C_I^{r_h}(t), \\ \\ \tilde{\Psi}_{C_{he}}^*(t; \boldsymbol{\theta}_e^*(t)) - \tilde{\Psi}_{C_h}^*(t; \boldsymbol{\vartheta}_e^*(t)) \geq \mathbf{D}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t) \cdot \{\boldsymbol{\theta}_e^*(t) - \boldsymbol{\vartheta}_e^*(t)\}, \quad \forall \boldsymbol{\theta}_e^*(t) \in C_B^{s_h}(t). \\ \\ \text{con } \{\boldsymbol{\lambda}_e^*\} \in Q_{N_h}^* \text{ satisfaciendo las condiciones de transmisión :} \\ \\ 0 \geq \sum_{e=1}^E \boldsymbol{\lambda}_e^* \boldsymbol{\alpha}_e(t) \cdot (\boldsymbol{\mu}_e^* - \boldsymbol{\lambda}_e^*), \quad \forall \{\boldsymbol{\mu}_e^*\} \in Q_{N_h}^* \end{array} \right. \quad (7.19)$$

Los conjuntos convexos locales de admisibilidad son:

$$\begin{aligned}
K_{\widehat{u}_{h_e}} &= \left\{ \beta \in R^{m_{h_e}} : \sum_{j=i}^{m_{h_e}} \beta_j \chi_j^e = \widehat{u}_{h_e}, \text{ en } \partial\Omega_D^e \right\}, \\
\mathfrak{D}(\widetilde{\Phi}_{eh}^*) &= C_I^{r_h} = \left\{ \rho^* \in R^{r_{h_e}} : \phi^* \left( \sum_{j=i}^{r_{h_e}} \rho_j^* \xi_j^e \right) \in L^1(\Omega_e) \right\}, \\
\mathfrak{D}(\widetilde{\Psi}_{C_{he}}^*) &= C_B^{s_h} = \left\{ \theta^* \in R^{s_{h_e}} : \psi_C^* \left( \sum_{j=i}^{s_{h_e}} \theta_j^* \zeta_j^e \right) \in L^1(\partial\Omega_C^e) \right\}.
\end{aligned} \tag{7.20}$$

Las matrices y vectores del sistema estan definidos como sigue, para  $i, j = 1, 2, \dots, m_{h_e}$   $r = 1, 2, \dots, r_{h_e}$ ,  $s = 1, 2, \dots, s_{h_e}$ ,  $l = 1, 2, \dots, l_{h_e}$  :

$$\begin{aligned}
M_{ij}^e &= \int_{\Omega_e} \phi_e \chi_j^e \chi_i^e d\Omega, \\
A_{ij}^e &= \int_{\Omega_e} \mathbf{D} \text{grad} \chi_j^e \cdot \text{grad} \chi_i^e d\Omega, \\
B_{ij}^e &= \int_{\Omega_e} \mathbf{w} \cdot \text{grad} \chi_j^e \chi_i^e d\Omega, \\
f_i^e &= \int_{\Omega_e} f \chi_i^e d\Omega + \int_{\partial\Omega_N^e} \widehat{g} \gamma \chi_i^e d\partial\Omega, \\
C_{ri}^e &= \int_{\Omega_e} \xi_r^e \chi_i^e d\Omega, \\
D_{si}^e &= \int_{\partial\Omega_C^e} \zeta_s^e \gamma \chi_i^e d\partial\Omega, \\
E_{ij} &= \int_{\Omega_e} q_e \chi_j^e \chi_i^e d\Omega, \\
\Lambda_{li} &= \int_{\Gamma_e} \eta_l^e \chi_i^e d\Gamma.
\end{aligned} \tag{7.21}$$

Los funcionales de control estan dados por:

$$\Phi_{h_e}^*(\rho^*) = \int_{\Omega_e} \phi^* \left( \sum_{j=i}^{r_{h_e}} \rho_j^* \xi_j^e \right) d\Omega, \quad \rho^* \in \mathfrak{D}(\widetilde{\Phi}_{eh}^*) = C_I^{r_h},$$

(7.22)

$$\Psi_{h_e}^*(\theta^*) = \int_{\partial\Omega_C^e} \psi_C^* \left( \sum_{j=i}^{s_{h_e}} \theta_j^* \zeta_j^e \right) d\partial\Omega, \quad \theta^* \in \mathfrak{D}(\tilde{\Psi}_{C_{h_e}}^*) = C_B^{s_h}.$$

Como subespacio dual de sincronización, suponemos que las aproximaciones de elemento finito de frontera interna (7.17) coinciden en las interfaces, entonces tomamos la versión discreta de (7.11):

$$\mathbf{Q}_{N_h}^* = \left\{ \{\mu_e^*\} \in \prod_{e=1}^E R^{r_{h_e}} : \sum_{j=1}^{r_{h_e}} \mu_j^{*e} \eta_j^e = - \sum_{j=1}^{r_{h_f}} \mu_j^{*f} \eta_j^f \text{ sobre } \Gamma_{ef}, 1 \leq e < f \leq E \right\} \quad (7.23)$$

Una característica importante de la macrohíbrización que estamos usando en nuestro modelo es que podemos tratar la interface  $\Gamma_{ef}$  entre dos subdominios como un subdominio más del sistema y los elementos finitos de la interface son independientes y pueden no coincidir con los elementos finitos de los subdominios  $e$  y  $f$ .

## 7.5 Algoritmos de resolución tipo Uzawa de los problemas macrohíbridos mixtos primal y dual de control de difusión y advección de contaminantes.

En esta sección presentaremos los algoritmos de resolución para el problema discreto macrohíbrido mixto de control de difusión y advección de contaminantes, estos algoritmos han sido trabajados, en [31] y [33], para desigualdades variacionales macrohíbridas mixtas, aplicando la metodología de resolventes propuesta en [30].

### 7.5.1 Forma subdiferencial de los problemas mixtos primal y dual

En primer lugar expresamos el problema macrohíbrido mixto primal en forma subdiferencial:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Para } t \in (0, T), \text{ para } e = 1, 2, \dots, E, \text{ encontrar } \boldsymbol{\alpha}_e \in K_{\hat{u}_{he}} : \\
 -\boldsymbol{\Lambda}_e^T \boldsymbol{\lambda}_e^* \in \mathbf{M}_e \frac{d\boldsymbol{\alpha}_e(t)}{dt} + \mathbf{A}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t) + \mathbf{B}_e(t) \boldsymbol{\alpha}_e(t) - \mathbf{f}_e(t) \\
 + \partial \tilde{\Phi}_{he}^*(t; \boldsymbol{\alpha}_e(t)) + \partial \tilde{\Psi}_{C_{he}}^*(t; \boldsymbol{\alpha}_e(t)) \partial I_{K_{\hat{u}_{he}}}(\boldsymbol{\alpha}_e(t)), \\
 \boldsymbol{\alpha}_e(0) = \boldsymbol{\alpha}_{0e}, \\
 \text{y } \{\boldsymbol{\lambda}_e^*\} \in \mathbf{Q}_{N_h}^* \text{ satisfaciendo las condiciones de sincronización :} \\
 \{\boldsymbol{\Lambda}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t)\} \in \partial I_{\mathbf{Q}_{N_h}^*}(\{\boldsymbol{\lambda}_e^*\}).
 \end{array} \right. \quad (7.24)$$

Expresamos el problema macrohíbrido mixto dual en forma subdiferencial:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Para } t \in (0, T), \text{ para } e = 1, 2, \dots, E, \text{ encontrar } \boldsymbol{\alpha}_e \in K_{\hat{u}_{he}} \\
 \text{y } (\boldsymbol{\pi}_e^*, \boldsymbol{\vartheta}_e^*) \in \mathcal{D}(\tilde{\Phi}_{eh}^*) \times \mathcal{D}(\tilde{\Psi}_{C_{he}}^*) \text{ tal que :} \\
 -\mathbf{C}_e^T \boldsymbol{\pi}_e^*(t) - \mathbf{D}_e^T \boldsymbol{\vartheta}_e^*(t) - \boldsymbol{\Lambda}_e^T \boldsymbol{\lambda}_e^* \in \mathbf{M}_e \frac{d\boldsymbol{\alpha}_e(t)}{dt} + \mathbf{A}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t) + \mathbf{B}_e(t) \boldsymbol{\alpha}_e(t) - \mathbf{f}_e(t) + \partial I_{K_{\hat{u}_{he}}}(\boldsymbol{\alpha}_e(t)), \\
 \mathbf{C}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t) \in \partial \tilde{\Phi}_{he}^*(t; \boldsymbol{\pi}_e^*(t)), \\
 \mathbf{D}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t) \in \partial \tilde{\Psi}_{C_{he}}^*(t; \boldsymbol{\vartheta}_e^*(t)), \\
 \text{y } \{\boldsymbol{\lambda}_e^*\} \in \mathbf{Q}_{N_h}^* \text{ satisfaciendo las condiciones de sincronización :} \\
 \{\boldsymbol{\Lambda}_e \boldsymbol{\alpha}_e(t)\} \in \partial I_{\mathbf{Q}_{N_h}^*}(\{\boldsymbol{\lambda}_e^*\}).
 \end{array} \right. \quad (7.25)$$

### 7.5.2 Espacios producto

Entonces introducimos los vectores primales y duales y los espacios producto:

$$\boldsymbol{\alpha} = \{\boldsymbol{\alpha}_e\} \in \mathbf{V} = \prod_{e=1}^E R^{m_{he}}, \quad (7.26)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^* = (\{\boldsymbol{\pi}_e^*\}, \{\boldsymbol{\vartheta}_e^*\}, \{\boldsymbol{\lambda}_e^*\}) \in \mathbf{Y} = \prod_{e=1}^E R^{r_{he}} \times \prod_{e=1}^E R^{s_{he}} \times \prod_{e=1}^E R^{l_{he}},$$



y los operadores  $\mathcal{A} : \mathbf{V} \rightarrow 2^{\mathbf{V}}$ ,  $\mathbf{\Lambda} \in \mathcal{L}(V, Y)$  con transpuesta  $\mathbf{\Lambda}^T \in \mathcal{L}(Y, V)$  y el subdiferencial  $\partial \mathbf{G}^* : Y \rightarrow 2^Y$ , para  $\beta \in V$ ,  $\nu^* = (\{\rho_e\}, \{\theta_e\}, \{\nu_e\}) \in Y$ , definidos por:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}(\beta) &= \{(\mathbf{A}_e + \mathbf{B}_e)\beta_e\} + \left\{ \partial \mathbf{I}_{K_{\hat{u}_e}}(\beta_e) \right\} - \{\mathbf{f}_e\} \\
 \mathbf{\Lambda}\beta &= (\{\mathbf{C}_e\beta_e\}, \{\mathbf{D}_e\beta_e\}, \{\mathbf{\Lambda}_e\beta_e\}), \\
 \mathbf{\Lambda}^T \nu^* &= \{\mathbf{C}_e^T \rho_e\} + \{\mathbf{D}_e^T \theta_e\} + \{\mathbf{\Lambda}_e^T \nu_e\}, \\
 \partial \mathbf{G}^*(\nu^*) &= (\{\partial \Phi_{h_e}^*(\rho_e)\}, \{\partial \Psi_{h_e}^*(\theta_e)\}, \partial \mathbf{I}_{Q_{N_h}^*}(\{\nu_e\})).
 \end{aligned} \tag{7.27}$$

### 7.5.3 Formas mixtas primal y dual abstractas

Entonces el problema toma la forma mixta primal abstracta:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Encontrar } (\boldsymbol{\alpha}(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) \times \mathcal{D}(\mathbf{G}^*(t)) \text{ tal que :} \\
 -\mathbf{\Lambda}^T \boldsymbol{\lambda}^*(t) \in \mathbf{M}_e \frac{d\boldsymbol{\alpha}_e(t)}{dt} + \mathcal{A}(t; \boldsymbol{\alpha}(t)), \\
 \mathbf{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}(t) \in \partial \mathbf{G}^*(t; \boldsymbol{\lambda}^*(t)), \\
 \boldsymbol{\alpha}_e(0) = \boldsymbol{\alpha}_{0e}
 \end{array} \right. \tag{7.28}$$

Entonces el problema toma la forma mixta dual abstracta:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Encontrar } (\boldsymbol{\alpha}(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) \times \mathcal{D}(\mathbf{G}^*(t)) \text{ tal que :} \\
 -\mathbf{\Lambda}^T \boldsymbol{\lambda}^*(t) \in \mathcal{A}(t; \boldsymbol{\alpha}(t)), \\
 \mathbf{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}(t) \in \mathbf{M}^* \frac{d\boldsymbol{\lambda}^*(t)}{dt} + \partial \mathbf{G}^*(t; \boldsymbol{\lambda}^*(t)), \\
 \boldsymbol{\lambda}^*(0) = \boldsymbol{\lambda}_0^*.
 \end{array} \right. \tag{7.29}$$

Aquí  $\mathcal{D}(\cdot)$  es el dominio de su argumento, esto es  $\mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) = \{\boldsymbol{\beta} \in V : \mathcal{A}(t; \boldsymbol{\beta}(t)) \neq \emptyset\}$  y  $\mathcal{D}(\mathbf{G}^*(t)) = \{\eta^* \in Y : \mathbf{G}^*(t; \eta^*) \neq +\infty\}$ , y  $M : V \rightarrow V$ , ( $M^* : Y \rightarrow Y$ ) es la matriz de masa simétrica definida positiva del sistema primal o dual, con inversa denotada por  $M^{-1}$  ó  $M^{-*}$ .

#### 7.5.4 Esquema primal de integración en el tiempo

Dualizando (mediante la gráfica inversa) la ecuación dual del problema mixto primal (5.28) y suponiendo válida la relación [16]:

$$\partial(\mathbf{G}(t) \circ \Lambda) = \Lambda^T \circ \partial(\mathbf{G}(t) \circ \Lambda) \quad (7.30)$$

obtenemos el siguiente problema evolutivo primal:

$$\begin{cases} \text{Encontrar } \boldsymbol{\alpha}(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) : \\ 0 \in \mathbf{M} \frac{d\boldsymbol{\alpha}(t)}{dt} + \mathcal{A}(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) + \partial(\mathbf{G}(t) \circ \Lambda)(\boldsymbol{\alpha}(t)), \\ \boldsymbol{\alpha}(0) = \boldsymbol{\alpha}_0. \end{cases} \quad (7.31)$$

Ahora asociamos al problema primal un esquema de integración numérica en el tiempo, para  $m \geq 0$ , y denotando el paso del tiempo como  $r > 0$ .

#### Esquema semi-implícito de Euler primal

$$0 \in \mathbf{M} \frac{\boldsymbol{\alpha}^{m+1} - \boldsymbol{\alpha}^m}{r} + \mathcal{A}^m(\boldsymbol{\alpha}^m) + \partial(\mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda)(\boldsymbol{\alpha}^{m+1}). \quad (7.32)$$

De acuerdo con la metodología de resolventes, introduciendo la relación  $-\Lambda^T \boldsymbol{\lambda}_m^* \in \mathcal{A}^m(\boldsymbol{\alpha}^m)$ , y el operador  $\mathbf{M}$ -resolvente del subdiferencial  $\partial(\mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda)$ :

$$J_{\mathbf{M}, \partial(\mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda)}^r = (\mathbf{M} + r \partial(\mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda))^{-1}, \quad (7.33)$$

entonces el esquema semi-implícito de Euler puede ser expresado como:

$$\boldsymbol{\alpha}^{m+1} = J_{\mathbf{M}, \partial(\mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda)}^r(\mathbf{M} \boldsymbol{\alpha}^m + r \Lambda^T \boldsymbol{\lambda}_m^*) \quad (7.34)$$

Entonces considerando la caracterización del operador resolvente en términos de la gráfica de  $\mathbf{M}$ -proximidad (relativa a la norma  $\|\cdot\|_M$  inducida por el producto interno  $(\mathbf{M}\cdot, \cdot)_V$ ) [29]:

$$\begin{aligned} J_{\mathbf{M}, \partial(\mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda)}^r \circ \mathbf{M}(w) &= \text{Prox}_{\mathbf{M}, r \mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda}(w) \\ &= \arg\left( \inf_{v \in D(r \mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda)} \left\{ \frac{1}{2} \|v - w\|_M^2 + r \mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda(w) \right\} \right). \end{aligned} \quad (7.35)$$

Concluimos la siguiente interpretación del esquema semi-implícito de Euler primal:

**Algoritmo**  $ALG\ 0_M$  :

$$(ALG0_M) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \boldsymbol{\alpha}_0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^0) \cap \mathcal{D}(\mathbf{G}^0 \circ \Lambda), \text{ conocido } \boldsymbol{\alpha}^m, \quad m \geq 0, \\ \text{Emcontrar } \boldsymbol{\lambda}_m^* \text{ y } \boldsymbol{\alpha}^{m+1} \text{ tal que :} \\ -\mathbf{\Lambda}^T \boldsymbol{\lambda}_m^* \in \mathcal{A}^m(\boldsymbol{\alpha}^m), \\ \boldsymbol{\alpha}^{m+1} = \text{Prox}_{\mathbf{M}, r\mathbf{G}^{m+1} \circ \Lambda}(\boldsymbol{\alpha}^m + r\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Lambda}^T \boldsymbol{\lambda}_m^*). \end{array} \right. \quad (7.36)$$

La convergencia del esquema semi-implícito de Euler primal , algoritmo (7.36), a un estado estacionario, se deriva de las propiedades, de contracción firme, del operador resolvente (7.34), suponiendo que el operador primal  $\mathcal{A}(t)$  es uniformemente, en  $t$ , Lipschitz continuo y fuertemente monótono, de donde existen constantes  $c$  y  $M$ , tal que el algoritmo converge cuando:

$$0 < r < \frac{2c}{M^2} \quad (7.37)$$

### 7.5.5 Esquemas duales de integración en el tiempo

Consideraremos esquemas de integración numérica en el tiempo para el problema mixto dual evolutivo. Para esto dualizamos la ecuación dual del sistema, utilizando la gráfica dual del operador primal  $\mathcal{A}(t) : V \rightarrow 2^V$  relativo a  $\Lambda$ , el cual en el sentido de Mosco[32] está definido por:

$$\mathcal{A}^*(t; \mu^*) = \{v^* \in Y : \exists \beta \in V, \quad v^* = -\Lambda\beta, \quad -\mathbf{\Lambda}^T \mu^* \in \mathcal{A}(t; \beta)\} \quad (7.38)$$

Este operador dual es monótono maximal cuando  $\mathcal{A}(t)$  es fuertemente monótono o  $\mathbf{\Lambda}^T \circ \Lambda$  es un isomorfismo en  $V$ . Entonces suponiendo una de estas condiciones identificamos (7.29) con el problema evolutivo dual:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } \boldsymbol{\lambda}^*(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\Lambda^*(t)) \cap \mathcal{D}(\mathbf{G}^*(t)) : \\ 0 \in M^* \frac{d\boldsymbol{\lambda}^*(t)}{dt} + \mathcal{A}_\Lambda^*(t; \boldsymbol{\lambda}^*(t)) + \partial \mathbf{G}^*(t; \boldsymbol{\lambda}^*(t)), \\ \boldsymbol{\lambda}^*(0) = \boldsymbol{\lambda}_0^*. \end{array} \right. \quad (7.39)$$

en el sentido de que para  $t \in (0, +\infty)$ ,  $(\boldsymbol{\alpha}(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) \times \mathcal{D}(\mathbf{G}^*(t))$  es una solución del problema mixto evolutivo dual (7.29), entonces,  $\boldsymbol{\lambda}^*(t)$  es una solución del problema evolutivo dual (7.39). Recíprocamente si  $\boldsymbol{\lambda}^*(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\Lambda^*(t)) \cap \mathcal{D}(\mathbf{G}^*(t))$

es una solución del problema evolutivo dual (7.39), entonces  $\exists \boldsymbol{\alpha}(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t))$  tal que:

$$-\mathbf{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}(t) \in \mathcal{A}_{\Lambda}^*(t; \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \quad (7.40)$$

y  $(\boldsymbol{\alpha}(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t))$  es una solución del problema mixto evolutivo dual (7.29).

### 7.5.6 Esquemas de Euler duales de integración en el tiempo

#### Esquema semi-implícito de Euler dual:

$$0 \in M^* \frac{\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* - \boldsymbol{\lambda}_m^*}{r} + \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\boldsymbol{\lambda}_m^*) + \partial \mathbf{G}_{m+1}^*(\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^*). \quad (7.41)$$

#### Esquema implícito de Euler dual:

$$0 \in M^* \frac{\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* - \boldsymbol{\lambda}_m^*}{r} + \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^*) + \partial \mathbf{G}_{m+1}^*(\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^*). \quad (7.42)$$

Introducimos la relación, de (5.30),  $-\mathbf{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}_m \in \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\boldsymbol{\lambda}_m^*)$ , con versión primal  $-\mathbf{\Lambda}^T \boldsymbol{\lambda}_m^* \in \mathcal{A}^m(\boldsymbol{\alpha}_m)$ , para expresar el esquema semi-implícito en términos del  $M^*$  - resolvente del  $\partial \mathbf{G}_{m+1}^*$  como

$$\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* = J_{M^*, \partial \mathbf{G}_{m+1}^*}^r (M^* \boldsymbol{\lambda}_m^* + r \mathbf{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}_m) \quad (7.43)$$

Entonces por la relación:

$$J_{M^*, \partial \mathbf{G}_{m+1}^*}^r \circ M^* = \text{Pr } ox_{M^*, \partial \mathbf{G}_{m+1}^*} = I - M^{-*} \text{Pr } ox_{M^{-*}, r \mathbf{G}^{m+1} \circ (\frac{1}{r})I}, \quad (7.44)$$

el esquema dual semi-implícito de Euler tiene la interpretación:

#### Algoritmo ALG 4<sub>M\*</sub>

$$(ALG 4_{M^*}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \boldsymbol{\lambda}_0^* \in \mathcal{D}(\mathbf{G}_0^*), \text{ conocido } \boldsymbol{\lambda}_m^*, \quad m \geq 0, \\ \text{calcular } \boldsymbol{\alpha}^m \text{ y } \boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* \text{ tal que :} \\ -\mathbf{\Lambda}^T \boldsymbol{\lambda}_m^* \in \mathcal{A}^m(\boldsymbol{\alpha}^m), \\ \boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* = (I - M^{-*} \text{Pr } ox_{M^{-*}, r \mathbf{G}^{m+1} \circ (\frac{1}{r})I})(\boldsymbol{\lambda}_m^* + r M^{-*} \mathbf{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}_m). \end{array} \right. \quad (7.45)$$

Este algoritmo converge si, como se demuestra en [27, Teorema 6.1], el operador  $\mathcal{A}(t)$  es uniformemente Lipschitz continuo en  $t$ , fuertemente monótono y el operador  $\mathbf{\Lambda}$  es invertible y si el incremento en el tiempo satisface la relación, con  $c$  constante:

$$0 < r < 2c \tag{7.46}$$

Introduciendo la relación  $-\mathbf{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}^m \in \mathcal{A}_{\mathbf{\Lambda}_{m+1}}^m(\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^*)$  podemos identificar el esquema implícito de Euler para el problema dual con:

**Algoritmo**  $ALG\ 5_{M^*}$

$$(ALG5_{M^*}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \boldsymbol{\lambda}_0^* \in \mathcal{D}(\mathbf{G}_0^*), \text{ conocido } \boldsymbol{\lambda}_m^*, \quad m \geq 0, \\ \text{calcular } \boldsymbol{\alpha}^m \text{ y } \boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* \text{ tal que :} \\ -\mathbf{\Lambda}^T(I - M^{-*} \text{Pr ox}_{M^{-*}, r\mathbf{G}^{m+1} \circ (\frac{1}{r})I})(\boldsymbol{\lambda}_m^* + rM^{-*}\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}_m) \in \mathcal{A}^{m+1}(\boldsymbol{\alpha}^m), \\ \boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* = (I - M^{-*} \text{Pr ox}_{M^{-*}, r\mathbf{G}^{m+1} \circ (\frac{1}{r})I})(\boldsymbol{\lambda}_m^* + rM^{-*}\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}_m). \end{array} \right. \tag{7.47}$$

Otra interpretación del esquema implícito la obtenemos expresando (7.32) en la forma:

$$\begin{aligned} 0 &= M^* \frac{\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* - \boldsymbol{\lambda}_m^*}{r} - \mathbf{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}^{m+1} + p^{m+1}, \\ -\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}^{m+1} &\in \mathcal{A}_{\mathbf{\Lambda}_{m+1}}^*(\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^*), \\ p^{m+1} &\in \partial\mathbf{G}_{m+1}^*(\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^*) \end{aligned} \tag{7.48}$$

entonces identificamos el esquema implícito de Euler dual con el algoritmo:

**Algoritmo**  $ALG\ 1_{M^*}$

$$(ALG1_{M^*}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \boldsymbol{\lambda}_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_{\mathbf{\Lambda}_0}^*) \cap \mathcal{D}(\mathbf{G}_0^*), \text{ conocido } \boldsymbol{\lambda}_m^*, \quad m \geq 0, \\ \text{encontrar } p^{m+1}, \boldsymbol{\alpha}^{m+1}, \boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* \text{ tal que :} \\ \boldsymbol{\lambda}_m^* + rM^{-*}(\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}^{m+1} - p^{m+1}) \in \partial\mathbf{G}^{m+1}(p^{m+1}), \\ -\mathbf{\Lambda}^T(\boldsymbol{\lambda}_m^* + rM^{-*}(\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}^{m+1} - p^{m+1})) \in \mathcal{A}^{m+1}(\boldsymbol{\alpha}^{m+1}), \\ \boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* = \boldsymbol{\lambda}_m^* + rM^{-*}(\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}^{m+1} - p^{m+1}). \end{array} \right. \tag{7.49}$$

Notamos que en los algoritmos  $ALG5_{M^*}$  y  $ALG1_{M^*}$  la sucesión  $\{\lambda_{m+1}^*\}_{m \geq 0}$  viene en ambos casos de:

$$\lambda_{m+1}^* = J_{M^*, \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}^*}^* + \partial \mathbf{G}_{m+1}^*}^r(M^* \lambda_m^*), \quad (7.50)$$

podemos concluir que el esquema implícito de Euler converge a un estado estacionario si el operador  $\mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}^*}^* + \partial \mathbf{G}_{m+1}^*$  es monótono maximal [27, Teorema 2.1].

### 7.5.7 Esquemas de separación de operadores de integración en el tiempo

Consideremos los siguientes métodos de separación de operadores

#### Esquema de Douglas Rachford:

$$0 \in M^* \frac{\lambda_{m+1}^* - \lambda_m^*}{r} + \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\lambda_m^*) + \partial \mathbf{G}_{m+1}^*(\lambda_{m+1}^*), \quad (7.51)$$

$$0 \in M^* \frac{\lambda_{m+1}^* - \lambda_m^*}{r} + \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^*(\lambda_{m+1}^*) + \partial \mathbf{G}_{m+1}^*(\lambda_{m+1}^*).$$

#### Esquema de Peaceman Rachford:

$$0 \in M^* \frac{\lambda_{m+\frac{1}{2}}^* - \lambda_m^*}{\frac{r}{2}} + \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\lambda_m^*) + \partial \mathbf{G}_{m+\frac{1}{2}}^*(\lambda_{m+\frac{1}{2}}^*), \quad (7.52)$$

$$0 \in M^* \frac{\lambda_{m+1}^* - \lambda_{m+\frac{1}{2}}^*}{\frac{r}{2}} + \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^*(\lambda_{m+1}^*) + \partial \mathbf{G}_{m+\frac{1}{2}}^*(\lambda_{m+\frac{1}{2}}^*).$$

Introduciendo en el esquema de Douglas Rachford las relaciones:

$$\begin{aligned} -\Lambda \alpha^m &\in \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\lambda_m^*), \\ p^{m+1} &\in \partial \mathbf{G}_{m+1}^*(\lambda_{m+1}^*), \\ -\Lambda \alpha^{m+1} &\in \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^*(\lambda_{m+1}^*), \end{aligned} \quad (7.53)$$

obtenemos el siguiente :

**Algoritmo ALG 2<sub>M\*</sub>**

$$(ALG 2_{M^*}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \alpha^0 \in V \text{ y } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_{\Lambda_0}^*) \cap \mathcal{D}(\mathbf{G}_0^*), \text{ conocidos } \alpha^m, \lambda_m^*, \quad m \geq 0, \\ \text{encontrar } p^{m+1}, \alpha^{m+1}, \lambda_{m+1}^* \text{ tal que :} \\ \\ \lambda_m^* + rM^{-*}(\Lambda\alpha^m - p^{m+1}) \in \partial\mathbf{G}^{m+1}(p^{m+1}), \\ \\ -\Lambda^T(\lambda_m^* + rM^{-*}(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1})) \in \mathcal{A}^{m+1}(\alpha^{m+1}), \\ \\ \lambda_{m+1}^* = \lambda_m^* + rM^{-*}(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1}). \end{array} \right. \quad (7.54)$$

De la misma manera, bajo las relaciones (5.43) pero con:

$$p^{m+1} \in \partial\mathbf{G}_{m+1/2}^*(\lambda_{m+1/2}^*) \quad (7.55)$$

el esquema Peaceman Rachford puede ser identificado con el algoritmo:

**Algoritmo ALG 3<sub>M\*</sub>**

$$(ALG3_{M^*}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \alpha^0 \in V \text{ y } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_{\Lambda_0}^*) \cap \mathcal{D}(\mathbf{G}_0^*), \text{ conocidos } \alpha^m, \lambda_m^*, \quad m \geq 0, \\ \text{encontrar } p^{m+1}, \alpha^{m+1}, \lambda_{m+1/2}^*, \text{ y } \lambda_{m+1}^* \text{ tal que :} \\ \\ \lambda_m^* + \frac{r}{2}M^{-*}(\Lambda\alpha^m - p^{m+1}) \in \partial\mathbf{G}^{m+1/2}(p^{m+1}), \\ \\ \lambda_{m+1/2}^* = \lambda_m^* + \frac{r}{2}M^{-*}(\Lambda\alpha^m - p^{m+1}), \\ \\ -\Lambda^T(\lambda_{m+1/2}^* + \frac{r}{2}M^{-*}(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1})) \in \mathcal{A}^{m+1}(\alpha^{m+1}), \\ \\ \lambda_{m+1}^* = \lambda_{m+1/2}^* + \frac{r}{2}M^{-*}(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1}). \end{array} \right. \quad (7.56)$$

La convergencia de estos dos algoritmos ha sido analizada en [27] y [33].

## Capítulo 8

### EXPERIMENTACIÓN NUMÉRICA

Para la aplicación al control de contaminantes en un acuífero consideraremos un problema clásico [36]. Consideremos un dominio  $\Omega$  del problema, un acuífero o parte de él, en el que hay un flujo general determinado por las condiciones en la frontera y las fuentes y sumideros en el interior, la recarga y pozos de extracción de agua potable, (Fig.8.1). Se dividió el dominio del problema en cuatro subdominios  $\Omega_1$ ,  $\Omega_2$ ,  $\Omega_3$  y  $\Omega_4$ . En algún lugar del acuífero, en  $\Omega_1$ , existe una fuente de contaminación, por ejemplo un basurero, un depósito de residuos industriales o un derrame de sustancias químicas, de las que escurren sustancias que se disuelven en alguna medida en el agua. Debido a la difusión, dispersión y advección los contaminantes pueden llegar hasta los pozos de agua potable.

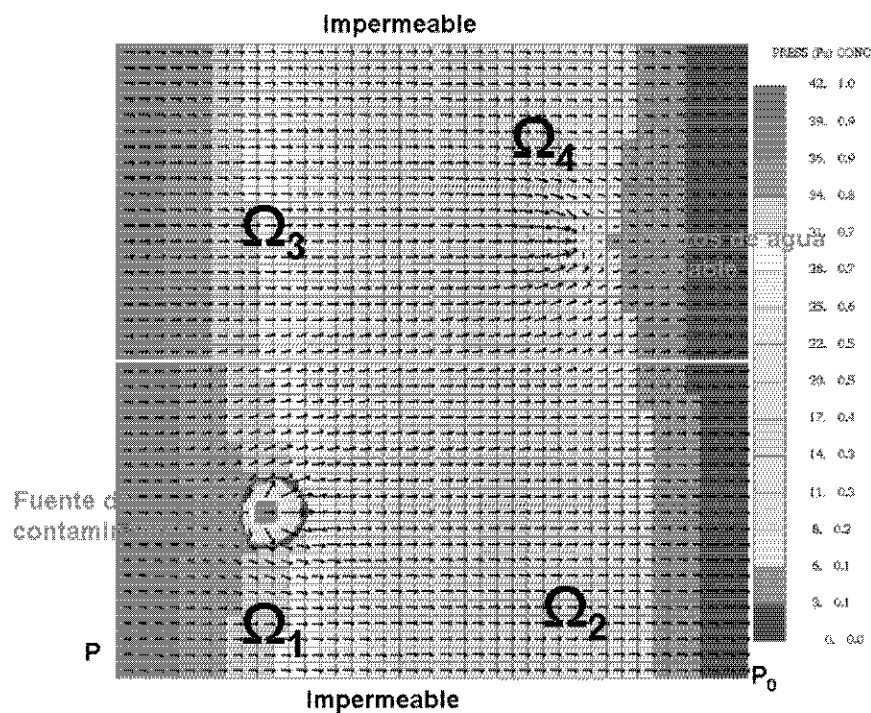


Fig.8.1.- Dominio del problema



El problema de control que simularemos consiste en establecer pozos de control de tal manera que en  $\Omega_2, \Omega_3$  y  $\Omega_4$ , y principalmente la parte del acuífero donde están los pozos de agua potable, la concentración de contaminantes, para toda  $t > 0$ , esté en un intervalo establecido de antemano  $u(x, t) \in [c_1, c_2]$ ,  $x \in \Omega_{2,3,4}$ . Esta restricción está descrita por el superpotencial convexo  $\phi(x, u(x, t))$  definido como:

$$\phi(x, u(x, t)) = \begin{cases} 0 & \text{si } u(x, t) \in [c_1, c_2] \\ +\infty & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (8.1)$$

cuya gráfica es (Fig.8.2):

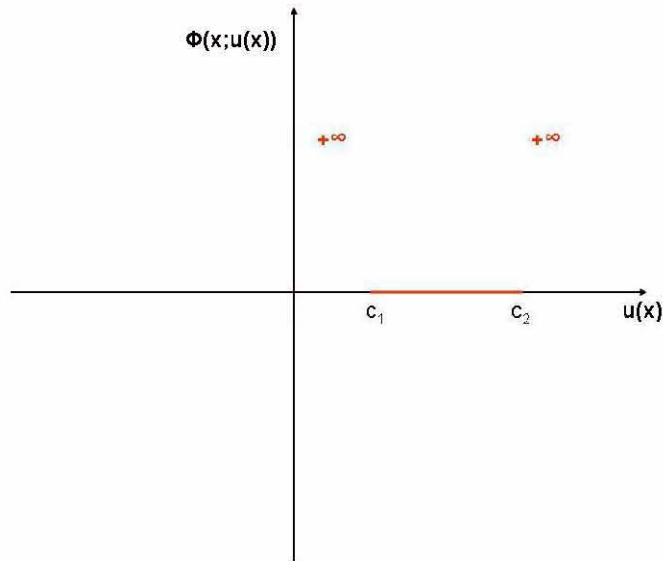


Fig. 8.2 Superpotencial de control, modela las restricciones.

La acción controlante está dada por el subdiferencial monótono multivaluado  $\partial\phi(x, u(x, t))$  definido como:

$$\partial\phi(x, u(x, t)) \in \begin{cases} (-\infty, c_1] & \text{si } u(x, t) = c_1 \\ \{0\} & \text{si } u(x, t) \in [c_1, c_2] \\ \{c_2, \infty\} & \text{si } u(x, t) = c_2 \end{cases} \quad (8.2)$$

cuya gráfica es (Fig.8.3):

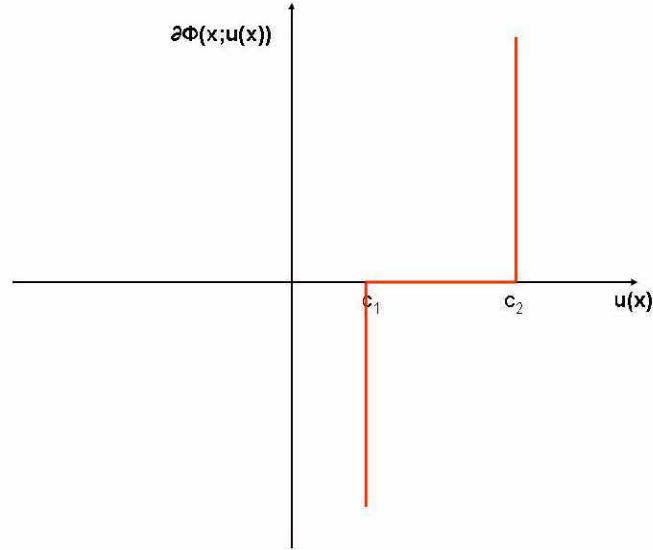


Fig. 8.3 Subdiferencial de control, modela la acción controlante.

Como vimos en el texto el subgradiente  $p^* = qu$ , donde  $q = \text{div } \mathbf{w}$  es una fuente o sumidero del campo de flujo con contaminante, está dado por:

$$\begin{aligned}
 p^*(x, t) &= -\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \varepsilon \text{div}(D(x) \text{gradu}(x, t)) - \mathbf{w}(x, t) \cdot \text{gradu}(x, t) + f(x, t) \\
 &\in \partial\phi(x, u(x, t)), \quad (x, t) \in Q = \Omega \times T.
 \end{aligned}
 \tag{8.3}$$

Este subdiferencial aparece implícitamente en el modelo macrohíbrido mixto primal y explícitamente como campo incógnita en el modelo macrohíbrido mixto dual.

El modelo que usamos para modelar el control de contaminantes en el acuífero es el modelo macrohíbrido mixto primal, con el cual encontramos simultáneamente el campo de presiones, el de velocidades y el de concentraciones. Este modelo, para cumplir con las restricciones, define una acción controlante para cada  $x \in \Omega_{2,3,4}$ ,  $t \in [0, T]$ . En su versión discreta, en cada elemento finito de estos subdominios, define un pozo de control, el cual se activa cuando las restricciones no se cumplen. Esto nos permite jugar con las fuentes y sumideros de flujo con contaminantes para realizar varios experimentos de control de contaminantes en el acuífero.

Como base para la experimentación numérica tomaremos el algoritmo *ALG 5* programado por Norberto Vera [37], al cual le agregamos el modulo de control.

### 8.1 Refinamiento de la malla y del paso del tiempo

Antes de iniciar los experimentos, corremos el programa del modelo macrohíbrido, ALG 5, sin control, para ver las condiciones en las cuales la solución numérica, deja de presentar o se disminuyen las oscilaciones espurias debidas al término de advección el cual es antisimétrico.

Para esto partimos de una malla de 10 x 10 en cada uno de los cuatro subdominios y observamos que el flujo de contaminantes al cruzar la frontera interna presenta oscilaciones espurias muy grandes, que con el transcurso del tiempo se propagan hacia todo el dominio ocupado por el contaminante (ver Fig.8.4).

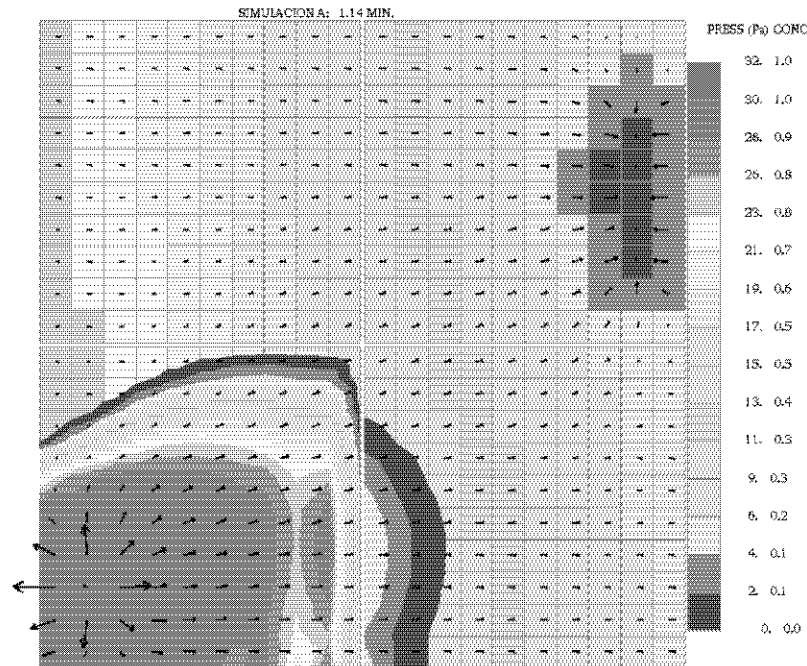


Fig.8.4 Oscilaciones espurias de la solución.

En seguida manteniendo la misma malla en los subdominios y el mismo paso del tiempo,  $(100 \Delta t)$ , refinamos la malla de frontera interna de 10 a 15 elementos finitos, en este caso unidimensionales, para cada frontera interna entre los subdominios  $\Omega_i$  y  $\Omega_j$ . Y se observa una mejora significativa en el comportamiento de la solución numérica, las oscilaciones casi desaparecen, (ver Fig.8.5).

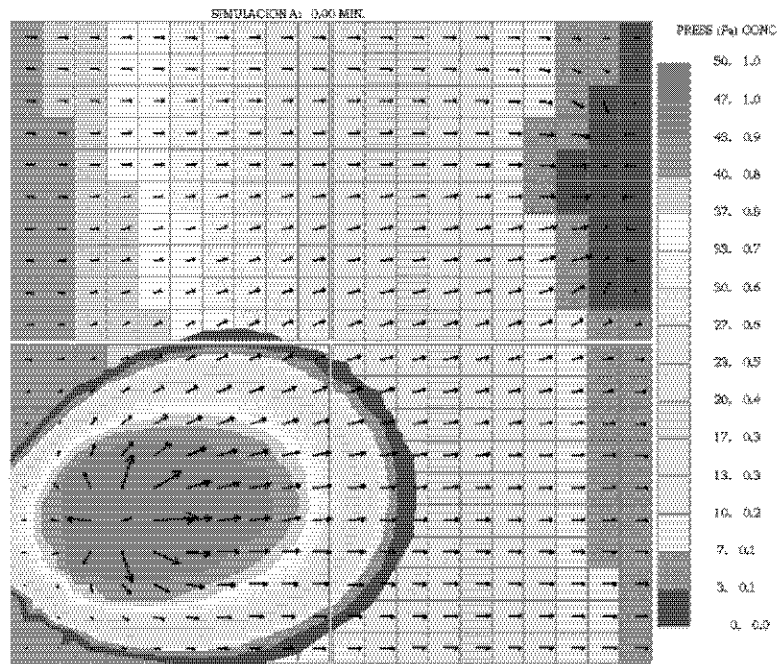


Fig.8.5 Las oscilaciones espurias desaparecen refinando la malla de frontera interna.

Se repite el experimento usando una malla de 20 x 20 y 30 de frontera interna y con una malla de 30 x 30 y 45 de frontera interna, y se observa que, para un mismo tiempo de evolución, las solución numéricas prácticamente coinciden, ver Figs. 8.6 y 8.7.

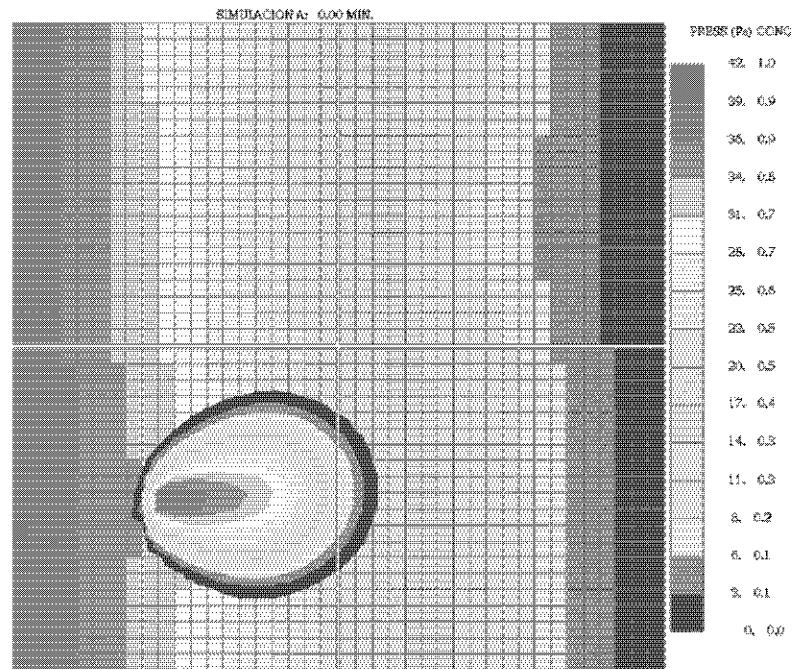


Fig. 8.6 Simulación en una malla de 20x20 con frontera f30, para  $t = 900\Delta t$ .

Se propone para la experimentación numérica, tomar una malla de 20 x 20 para cada subdominio y una malla de 30 para cada frontera interna así como un paso del tiempo de 10  $\Delta t$ ,  $\Delta t = 1200 \text{ seg}$ .

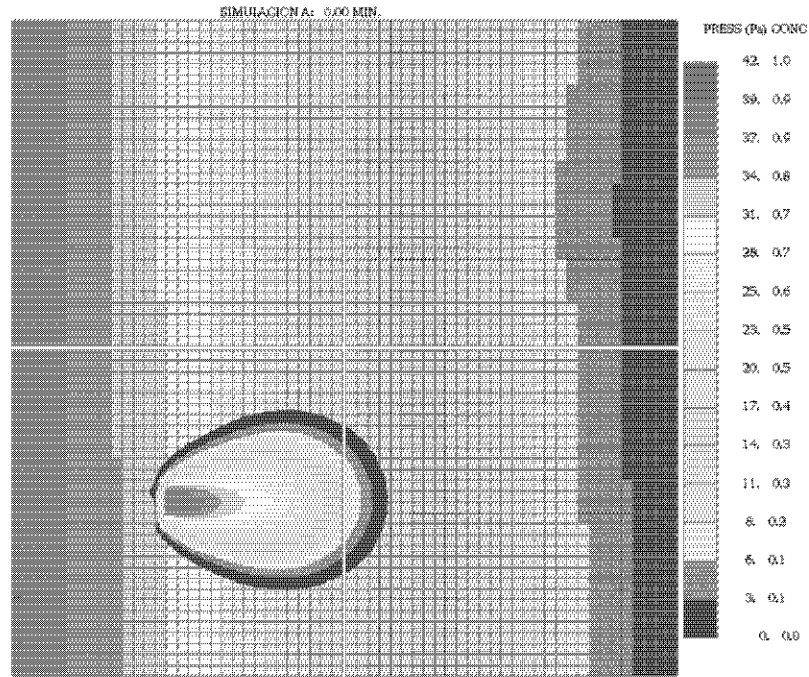


Fig. 8.7 Simulación con malla 30x30 f45 en el tiempo  $t = 900\Delta t$ .

## 8.2 Experimento 1

En este experimento tenemos un derrame permanente, por ejemplo un basurero o un depósito de residuos industriales, se observa la evolución del mismo sin control y con control. En este experimento consideramos un dominio  $\Omega$ , un acuífero o parte de él, dividido en cuatro subdominios  $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, \Omega_4$ , con presión prescrita  $p_1$  en una parte de la frontera,  $p_0$  en otra parte y velocidad normal  $v_n = 0$  prescrita en otra parte de la frontera de  $\Omega, \partial\Omega_N$ , de tal manera que hay un flujo general en el acuífero. En el subdominio  $\Omega_1$  hay una fuente de contaminación permanente que genera lixiviados que se difunden en y son arrastrados por el flujo general del fluido en el acuífero. En  $\Omega_4$  hay un campo de pozos para agua potable. La densidad y viscosidad del fluido residente son de  $\rho_0 = 1000Kg/m^3$  y  $\nu_i = 0.001(Pa - s)$  y de  $\rho_1 = 1000Kg/m^3$  y  $\nu_i = 0.0005(Pa - s)$  las del fluido contaminante. El caudal de fluido contaminante es de  $\hat{q} = 3qg$ ,  $qg = 0.005m^3/s$  y la concentración de este es de  $cg = 1.000Kg/m^3$ . Las restricciones son  $c_1 = 0.001cg$ ,  $c_2 = 0.1cg$ . Los caudales de los tres pozos de agua potable son  $q = -qg$ . La porosidad  $\phi = 0.25$ , la permeabilidad del medio  $K_x = K_y = 10^{-12}$ . La difusividad molecular y la dispesividad longitudinal y transversal son  $D_m = 0.00$ ,  $D_L = 0.009$  y  $D_T = 0.009$ . Todos estos parámetros pueden variarse para considerar un medio, un contaminante y fluido en particular.

El objetivo del control es que en  $\Omega_2, \Omega_3$  y  $\Omega_4$  la concentración de contaminantes esté entre dos valores fijos  $0 \leq c_1 \leq u(x, t) \leq c_2$ . El modelo desarrollado nos define un pozo de control virtual en cada  $x \in \Omega_2, \Omega_3, \Omega_4$  tal que cuando la concentración  $u(x, t) > c_2$ ,  $x \in \Omega_2, \Omega_3, \Omega_4$  los pozos de control se activen. Para comparar lo que sucede, la simulación se hace con pozos de control y sin pozos de control. Ver Figs. (Serie 1, "Evolución del sistema sin control" y Serie 2, "Evolución del sistema con control").

### 8.3 Resultados del modelo de control

Respecto a la experimentación numérica, el modelo usado es el modelo macrohíbrido de flujo miscible, dependiente del tiempo, sin y con control de contaminantes, en un fluido en medio poroso.

La serie 1 de figuras nos muestra la evolución del sistema sin la acción del control y observamos que con el transcurso del tiempo, la pluma de contaminantes llena  $\Omega_1, \Omega_2$  y eventualmente llega hasta los pozos de agua potable en  $\Omega_4$ .

La serie 2 de figuras muestra la evolución del sistema con control en  $\Omega_2, \Omega_3$  y  $\Omega_4$ , Podemos observar que al principio el sistema evoluciona de la misma manera que en el caso sin control, pero, cuando el contaminante penetra en  $\Omega_2$  y la concentración no cumple con las restricciones, es decir es mayor que  $c_2$ , entonces en los lugares en que esto sucede se activan los pozos de control evitando que el contaminante siga propagándose por  $\Omega_2, \Omega_3$  y  $\Omega_4$  manteniendo la concentración de contaminantes en estos subdominios dentro de las restricciones preestablecidas. Es decir se logra que para toda  $x \in \Omega_2, \Omega_3, \Omega_4$  y todo tiempo  $t \in [0, T]$  la concentración de contaminantes  $u(x, t)$  este entre  $c_1$  y  $c_2$  por lo que los objetivos del modelo se cumplen. Es importante notar que con el transcurso del tiempo si las condiciones no cambian el sistema parece llegar a un estado cuasi estacionario.

En la literatura clásica sobre el tema de control de la pluma de contaminantes, [36], [2], se definen los conceptos de zona de captura y barrera de potencial. La zona de captura es el área del acuífero cuyas líneas de flujo llegan a los pozos de control. Un criterio para la efectividad del control es que toda la pluma de contaminantes esté contenida dentro de la zona de captura de los pozos de control (lo cual es cierto sólo si tenemos advección dominante, y generalmente ese es el caso en acuíferos). El otro criterio es que se forme frente a la pluma de contaminantes una barrera de potencial hidrodinámica que impida el paso de contaminates a otras partes del acuífero. Ambas cosas se logran en este modelo, ver Fig. 8.8.

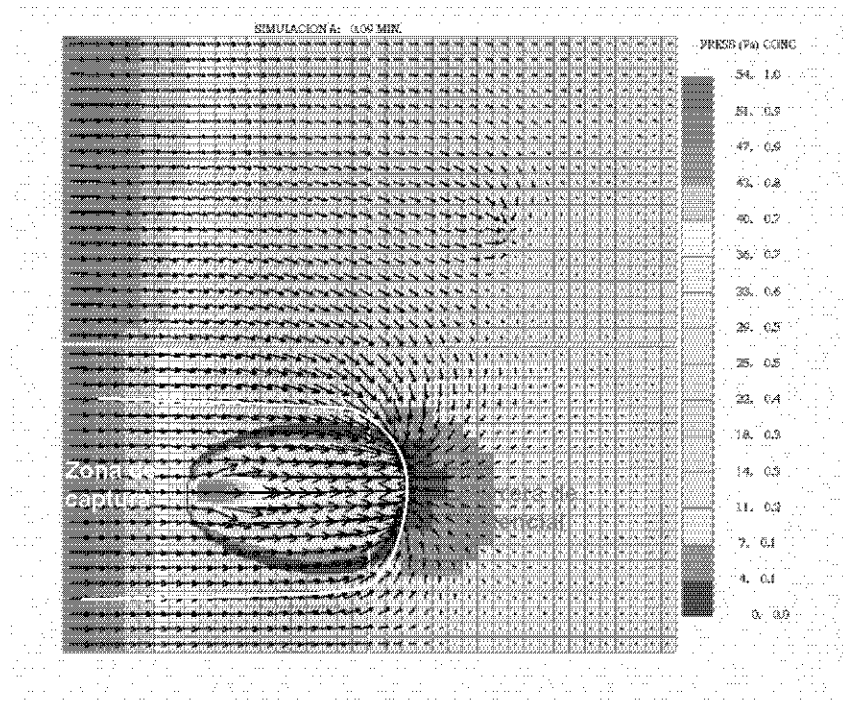


Fig. 8.8 Zona de captura y barrera de potencial

Este es un modelo vivo, si las condiciones variaran, por ejemplo si tuviéramos nuevos pozos de extracción de agua potable, u otras fuentes de contaminantes, o el flujo general cambiara, el modelo respondería automáticamente a estas situaciones y encendería los pozos que fueran necesarios para mantener la concentración de los contaminantes dentro de los límites preestablecidos. Un modelo de este tipo es una herramienta muy importante para el tomador de decisiones o para el manejador del acuífero, puesto que el autorizar nuevos pozos de extracción podría implicar también establecer nuevos pozos de control.



## Capítulo 9

### CONCLUSIONES

Este trabajo aporta tres aspectos que son relevantes: 1.- El uso de **modelos mixtos, velocidad - presión** para el flujo en medios porosos y **concentración - control** para el de difusión advección con control de contaminantes. 2.- El uso sistemático del **análisis convexo** para la **formulación variacional subdiferencial** del problema evolutivo, con valores en la frontera y restricciones de control, de la difusión y advección de contaminantes. Y 3.- La macrohibridización o **descomposición de dominios** del problema. Adicionalmente el uso de algoritmos iterativos de punto próximo tipo Uzawa para la resolución numérica del problema.

**Los modelos mixtos surgen de manera natural del modelo físico del problema**, puesto que, generalmente, tenemos una ecuación de balance y una ecuación constitutiva. Los modelos mixtos permiten encontrar simultáneamente, por ejemplo, la presión y la velocidad del fluido, como una función de la posición y el tiempo en el dominio del problema. Los métodos tradicionales generalmente resuelven para la presión, y mediante un postprocesamiento, encuentran la velocidad, lo que se traduce en una pérdida de información. En el caso del problema de difusión - advección con control de contaminantes el modelo mixto se logra introduciendo el campo de control como el campo dual.

**Las leyes que gobiernan el comportamiento y la evolución de un sistema físico real cumplen con ciertos principios muy generales llamados principios variacionales.** La formulación variacional local del sistema físico sometido a condiciones de frontera y restricciones, se obtiene de manera inmediata aplicando elementos del análisis convexo, tales como los de superpotencial, subdiferencial y dualización mediante la inversión de la gráfica. De tal manera que **las ecuaciones que gobiernan el interior del dominio del problema, las condiciones de frontera y las restricciones se expresan mediante ecuaciones subdiferenciales, (inclusiones), y sus correspondientes desigualdades variacionales.** Mediante la integración por partes y usando la fórmula de Green apropiada se obtiene la formulación variacional global del problema.

De esta manera, de las ecuaciones subdiferenciales locales, construimos modelos variacionales evolutivos del problema de control en el interior y en la frontera para la ecuación de difusión advección. Obteniendo dos modelos matemáticos y de

elemento finito, evolutivos, el modelo mixto primal y el modelo mixto dual de difusión advección con control de contaminantes en un fluido en medio poroso. En relación con la discretización en el tiempo, aplicamos el esquema semi-implícito de Euler al modelo primal de transporte y el esquema  $\theta$  de punto medio al modelo mixto.

**Descomposición de dominios.** Para considerar la heterogeneidad y anisotropía de las propiedades físicas así como la gran escala espacial de un acuífero real y la exactitud requerida en la aproximación de los campos de velocidad, presión y concentración, se hace indispensable la macrohibridización o descomposición de dominios del problema. El sistema es descompuesto en varios subsistemas que interactúan y se sincronizan a través de sus fronteras internas ó interfaces. **Esto se logra mediante la continuidad en las condiciones de transmisión de los campos de velocidad, presión y concentración y sus respectivos flujos. Las que se expresan mediante ecuaciones subdiferenciales.** Cada subsistema contiene un problema mas pequeño ó más simple de resolver que el problema original. Además, **ésto nos conduce a aprovechar de manera natural el cómputo en paralelo o en sistemas distribuídos que se desarrolla actualmente.**

Finalmente, integramos en **un modelo de flujo miscible, macrohíbrido, dependiente del tiempo, con control de contaminantes, en un medio poroso, directamente aplicable a acuíferos**, donde, para cada subdominio tenemos un modelo de flujo en medios Porosos, y un modelo de difusión - advección con control. Obtenemos los modelos matemáticos y de elemento finito, evolutivos, con descomposición de dominios, mixto primal y mixto dual, de control de contaminantes en un fluido en medio poroso. Resolvemos en cada paso del tiempo, el problema en cada subdominio y sincronizamos estas soluciones mediante las condiciones de transmisión. En relación con la discretización en el tiempo se utilizan los esquemas de Euler primal y dual. Obteniendo algoritmos de resolución de tipo Uzawa, entre ellos el *ALG 5* que es el que está programado, al cual le agregamos el módulo de control interno.

Se realizaron experimentos para aplicar el modelo a un problema clásico de control ó contención de una pluma de contaminantes, el modelo respondió perfectamente logrando mantener la concentración de contaminantes dentro de las restricciones establecidas de antemano en la región de interés. El modelo tiene la capacidad de responder a cualquier cambio en las condiciones del problema, y encender los pozos de control necesarios para mantener la concentración de contaminantes dentro de los límites preestablecidos.

En conclusión construimos un modelo mixto, o dos modelos mixtos acoplados en uno, que nos permite encontrar simultáneamente los campos de presiones y velocidades del fluido, así como los campos de concentración y de control de contaminantes, que es evolutivo, es macrohíbrido, usa descomposición de dominios que se coordinan mediante las condiciones de transmisión, permitiendo la paralelización del mismo. Permite además considerar heterogeneidades y anisotropías del medio, así como diversos fluidos y contaminantes. Además hemos logrado repetir resultados clásicos.

Este modelo puede ser de gran ayuda para la toma de decisiones en el manejo de acuíferos.

Este no es un modelo de control óptimo, para lograr el control óptimo habría que imponer además de que la concentración esté en un intervalo dado, otras restricciones, como por ejemplo que el número de pozos de control fuera un mínimo y que el gasto hidráulico de todos los pozos de control fuera mínimo, esto se sintetiza en minimizar un funcional de costo. Hacer un modelo de control óptimo es un buen objetivo para el futuro.

Otras tareas importantes para el futuro son las de hacer la simetrización o estabilización del problema de difusión advección, mediante las técnicas de upwind, las de Petrov-Galerkin o las de órbitas regresivas (características). Otra tarea es la de programar el modelo macrohíbrido mixto dual, puesto que con ese modelo encontraríamos explícitamente el campo de control para cada punto y cada tiempo. Otra tarea importante es construir el modelo para geometrías generales y tridimensionales.

## 9.1 Bibliografía

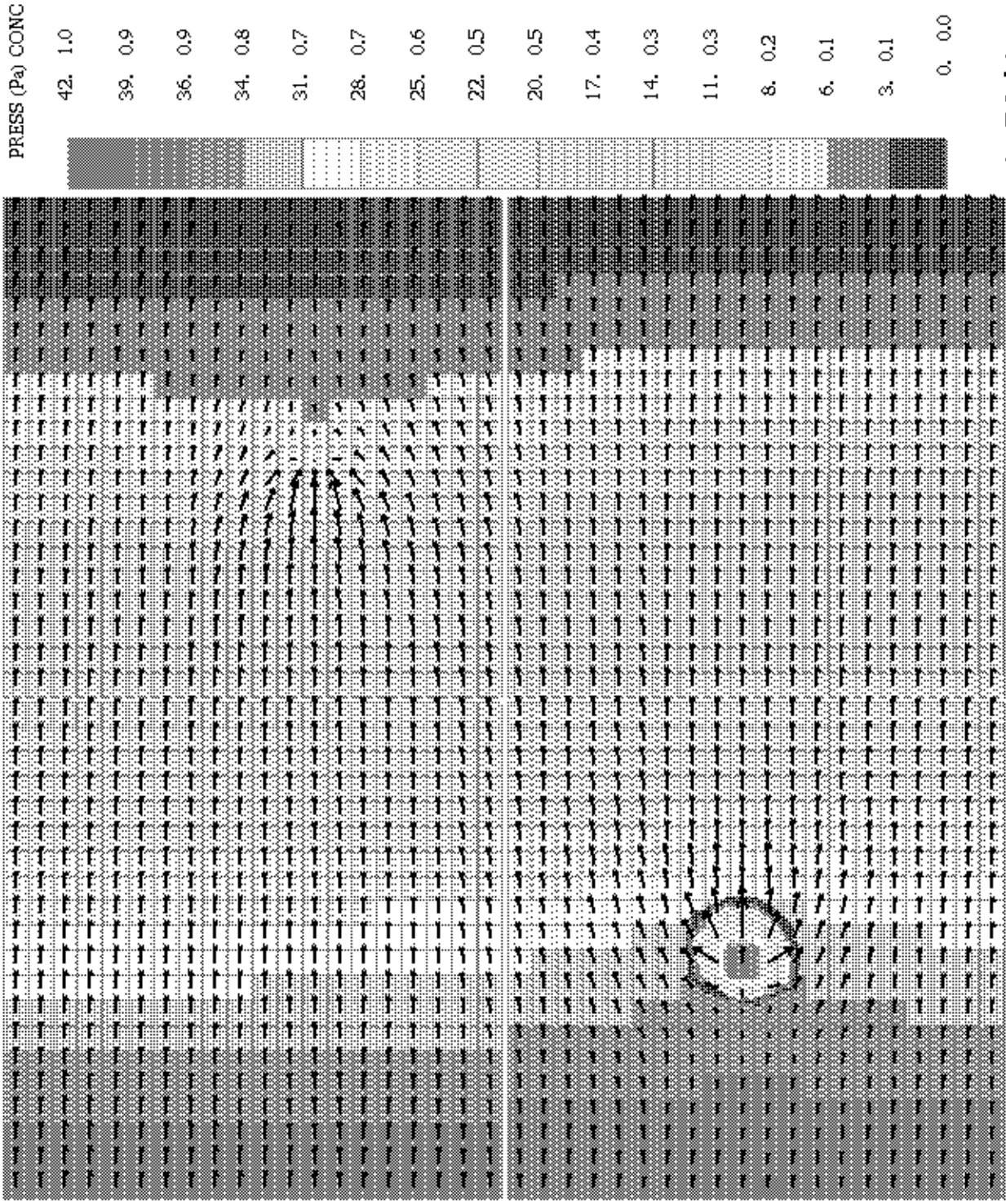
1. Caravias, Julia y Landa, Rosalva. Agua Medio Ambiente y Sociedad. Hacia la Gestión Integral de los Recursos Hídricos en México. UNAM, El Colegio de México, Fundación Gonzalo Rfo Arronte. México, 2005.
2. Fetter C. W. Contaminant Hidrogeology. Prentice Hall, Inc. New LJersey. 1999.
3. Alduncin, G., Subdifferential and Variational Formulations of Boundary Value Problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 72, North Holand, 1989
4. Alduncin G. On Gabay's algorithms for mixed variational inequalities. Numerical Functional Analysis and Optimization 1998; 72:173-186.
5. Rockafellar RT. Monótone operators and the proximal point algoritms. SIAM Jornal of Control and Optimizati3n1976,14:877-898.
6. Landau L.V. y Lifchifts A. V., Fluid Mechanics.
7. Chandrasekharaiah D. S. y Debnath L., Continuum Mechanics, Academic Press Inc., 1994.
8. Gurtin, Continuum Mechanics
9. Johnson, Claes. Numerical Solution of Partial differential Equations by the Finite Element Method, Cambridge University press, Cambridge, New York.
10. R. E. Showalter, Hilbert Space Methods for Partial Differential Equations, Pitman, London, 1977.
11. M. Táбата, A finite Element Approximation Corresponding to the Upwind differencing, Memoirs Num. Math. 1 (1977), pp 47-63.
12. M.O. Bristeau, On Numerical Soluti3ns of no Liner Problems in Fluid Dinamics by Least Squares and Finite Element Methods, Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg., 17/18 (1979), pp. 619-657.
13. Alduncin G. y Carrera J. Upwind Finite Element Approximations of the Advection-Diffusion Problem, Advances in Num. Partial Ecuations and Optimization, SIAM, Philadelphia, 1991.
14. Pironneau, O. Méthodes des Éléments Finis pour les Fluides, Recherches en Mathématiques Appliquées, Paris, 1988.
15. Alduncin G. Composition duality methods for evolution mixed variational inclusions, Nonlinear Analysis: Hibrid Systems. Elsevier Amsterdam, 2006, 336-363.
16. Ekeland, I. y Temam, R., Convex Analysis and Variational Problems, Studies in Mathematics and its Applicationns, Volume 1, North-Holland Publishing Company, Amsterdam-Oxford American Elsevier Publishing Company, Inc., New York. 1976
17. Alduncin, G., Duality and Variational Principles of Potential Boundary Value Problems, Comput. Maths. Appl.Mech. Engrg. 64 (1987), 468-485.
18. Duvaut, G. y Lions, J. L., Les Inéquations en Mécanique et en Physique, Dunond, París, 1972.
19. Showalter R. E.,Hilbert Space Methods for Partial Differential Equations, Pitman,

- London, 1977.
20. Glowinski, G., Lions, J. L. y Trémolières, R., Numerical Analysis of Variational Inequalities, North-Holland, Amsterdam, 1981.
  21. Glowinski, R., Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems, Springer, New York, 1984.
  22. Ikeda, T. Artificial viscosity in finite element approximations to the diffusion equation with drift terms, Lecture notes in numerical and applied analysis, vol 2, pp 59-78. Tokyo Kinokunilla, 1980.
  23. Raviart, P. A.; Thomas, J. M., Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles, Paris: Masson, 1983.
  24. Ciarlet, P. G., Basic error estimates for elliptic problems. In Ciarlet, P. G.; Lions, J. L., Handbook of numerical analysis, vol. 2, Finite element methods. Amsterdam: North Holland, 1991.
  25. Ikeda, T., Maximum principle in finite element models for convección-difusión phenomena, Lecture notes in numerical and applied analysis, vol. 4. Amsterdam: North Holland/Tokio: Kinokuniya, 1983.
  26. Kanayama, H. Discrete models for salinity distributions in a bay, conservation law and maximum principle. Theor. Appl. Mech. 28, 559-579, 1978.
  27. Gabay, D. Application de la méthode des multiplicateurs aux inéquations variationnelles. In Fortin, M.; Glowinski, R. (eds) Méthodes de Lagrangien Augmenté. Chap. 9. Paris: Dunod-Bordas, 1982.
  28. Moreau, J. J. Proximité et dualité dans une espace Hilbertienne. Bull. Soc. Math. France 93, 1965.
  29. Alduncin G. On Gabay's algorithms for mixed variational inequalities. Numerical Functional Analysis and Optimization 1998; 72:173-186.
  30. Alduncin, G., Primal and mixed upwind finite element approximations of control advection-diffusion problems. Computational Mechanics, Springer-Verlag, 1983.
  31. Alduncin, G. Numerical resolvent methods for macrohibrid mixed variational inequalities, Numer. Funct. Anal. and Optimiz. 19, 1998, 667-696.
  32. Mosco, U., Dual Variational Inequalities, J. Math. Anal. Appl. 40 (1972), 202-206.
  33. Lions, P.L. y Mercier, B., Splitting Algorithms for the Sum of Two Nonlinear Operators, SIAM J. Numer. Anal., 16 (1979), 964-976.
  34. Alduncin, G. Numerical resolvent methods for constrained problems in mechanics, Approx. Theory & its Appl., 12:4, Dec., 1996.
  35. Brezzi, F. Fortin, M. Mixed and Hybrid Finite Element Methods. Springer, New York. 1991
  36. Gorelick M. S, Freeze A. R., Donohue D. y Keely J. F., Grounwater Contamination Optimal Capture and Containment. Lewis Publishers. 1993.
  37. Alduncin, G., Nicolás, A., Vera-Guzmán, N. Macro-Hybrid Mixed Finite Element Schemes and Penalty-Duality Algorithms for Miscible Displacement in Porous Media. Por publicarse.

# **Serie 1**

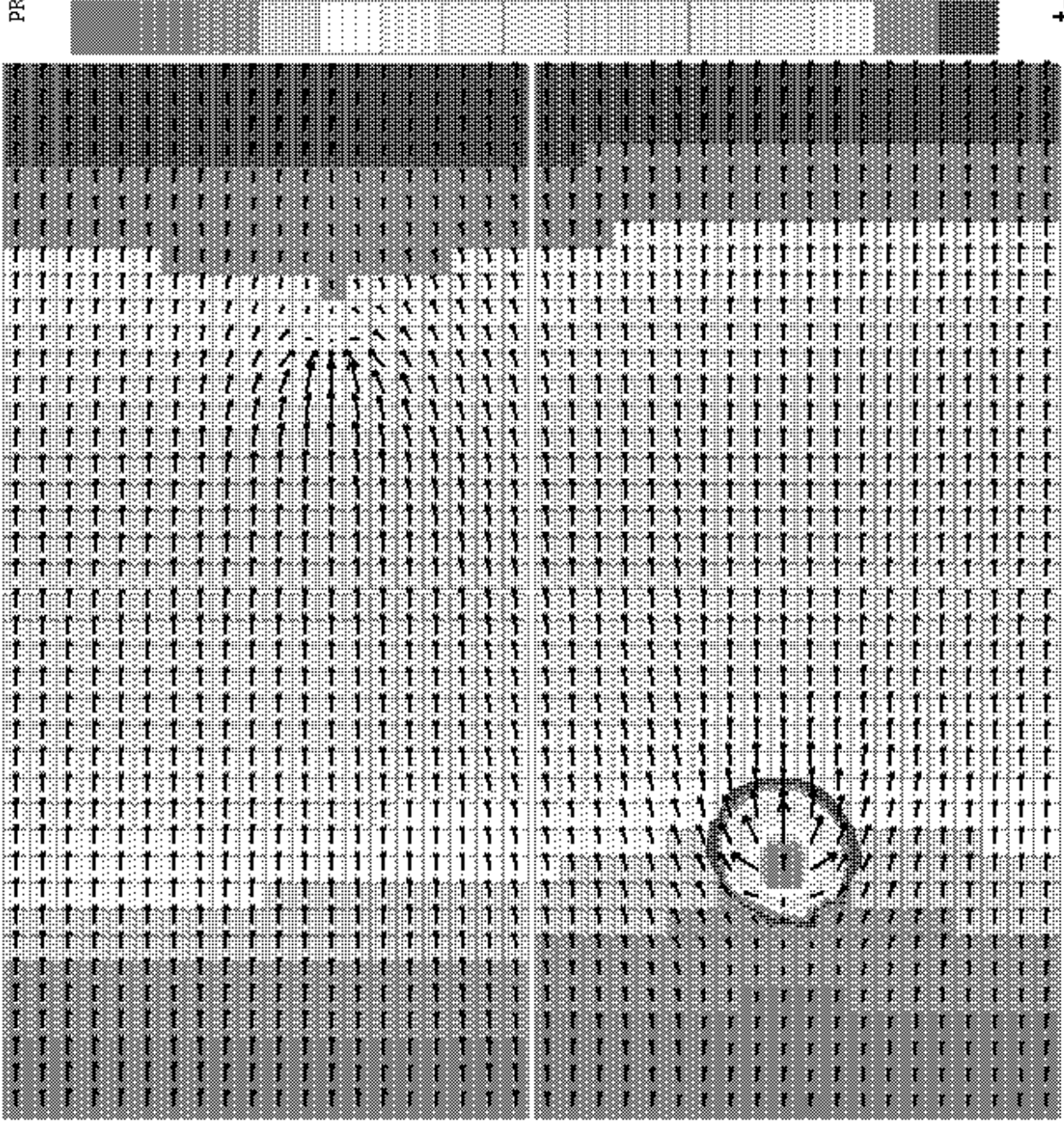
## **Evolución del Sistema Sin Control**

SIMULACION A: 0.00 MIN.



$t=50\Delta t$

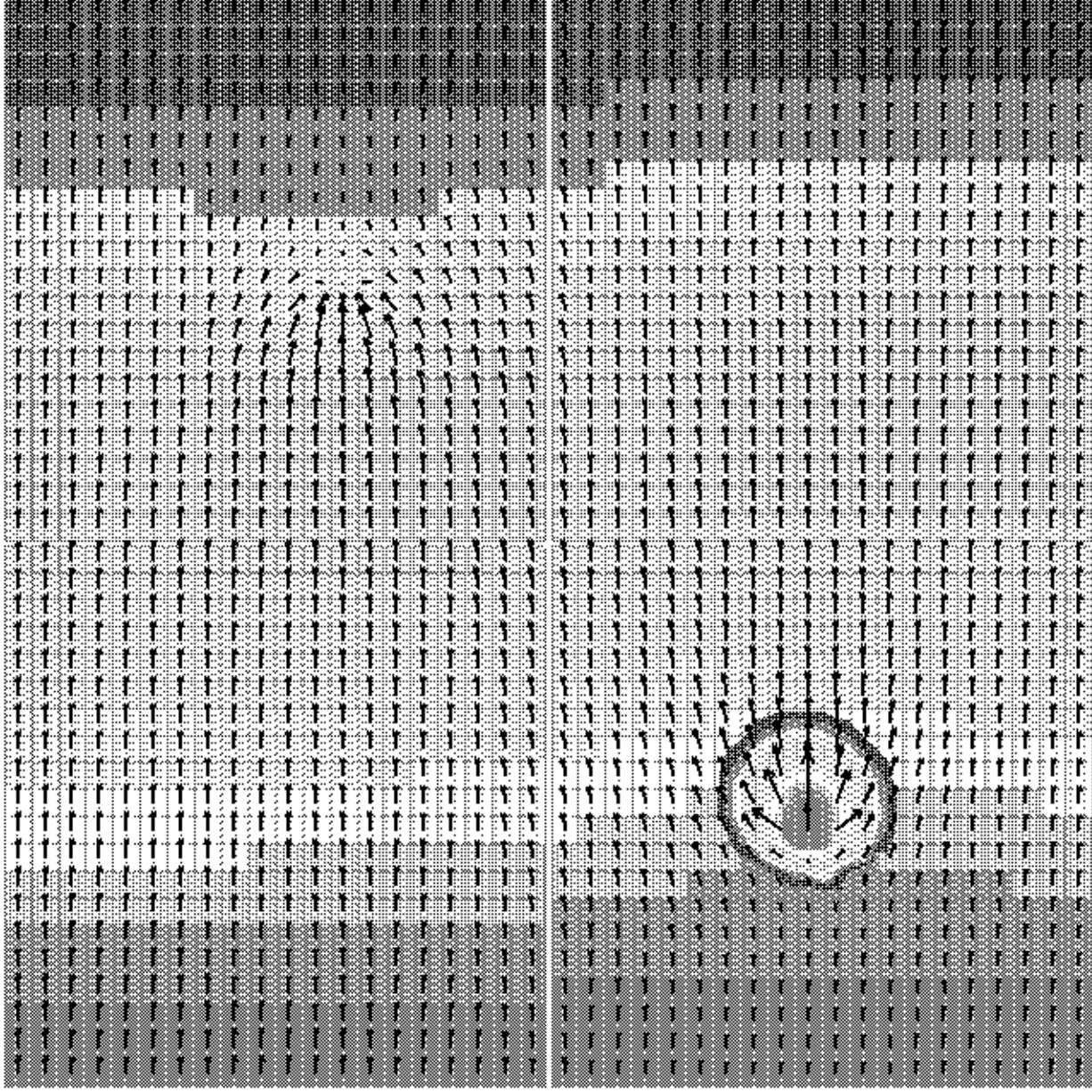
SIMULACION A: 0.00 MIN.



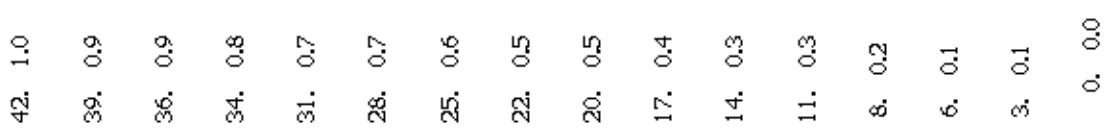
t=100Δt



SIMULACION A: 0.00 MIN.

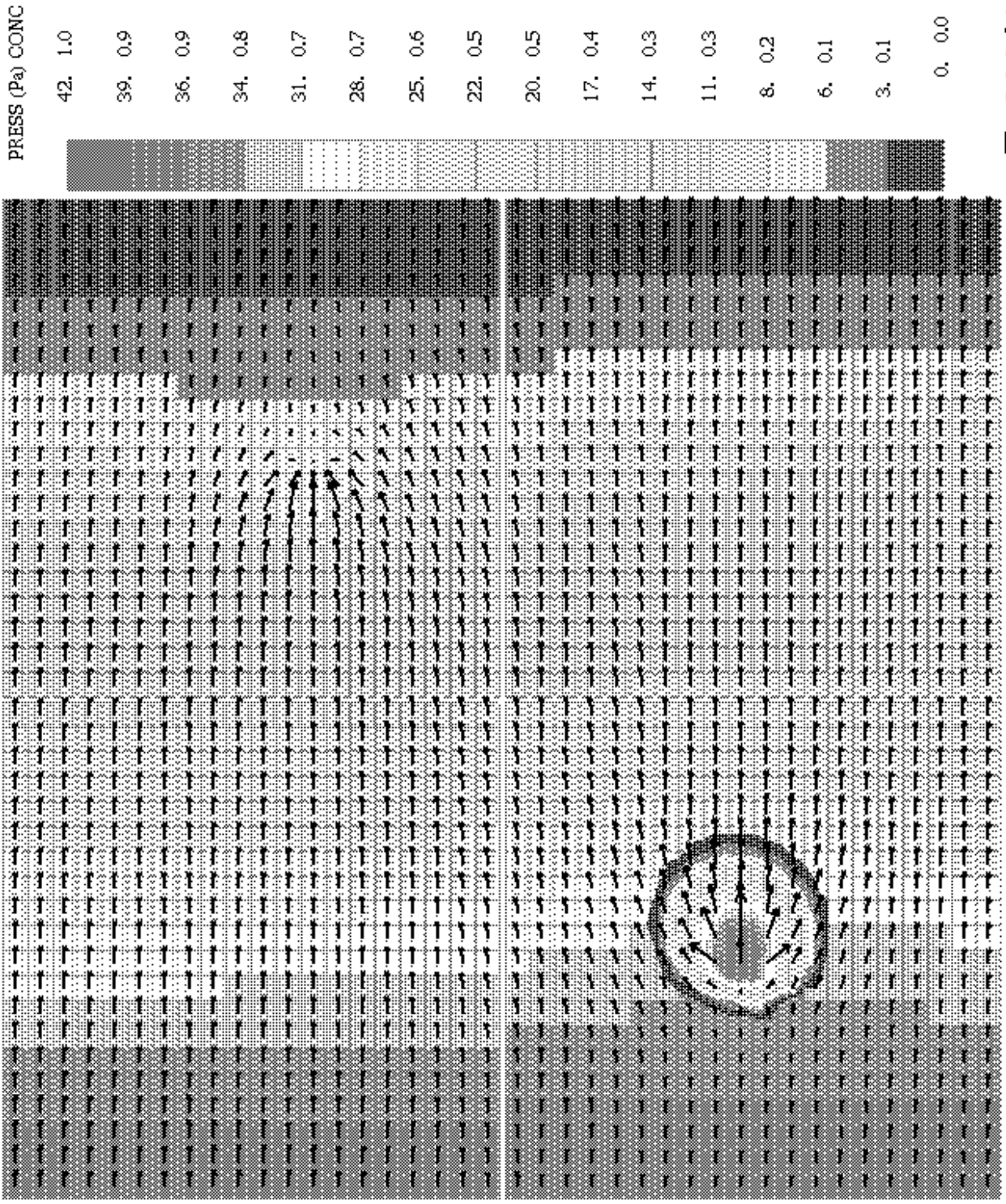


PRESS (Pa) CONC

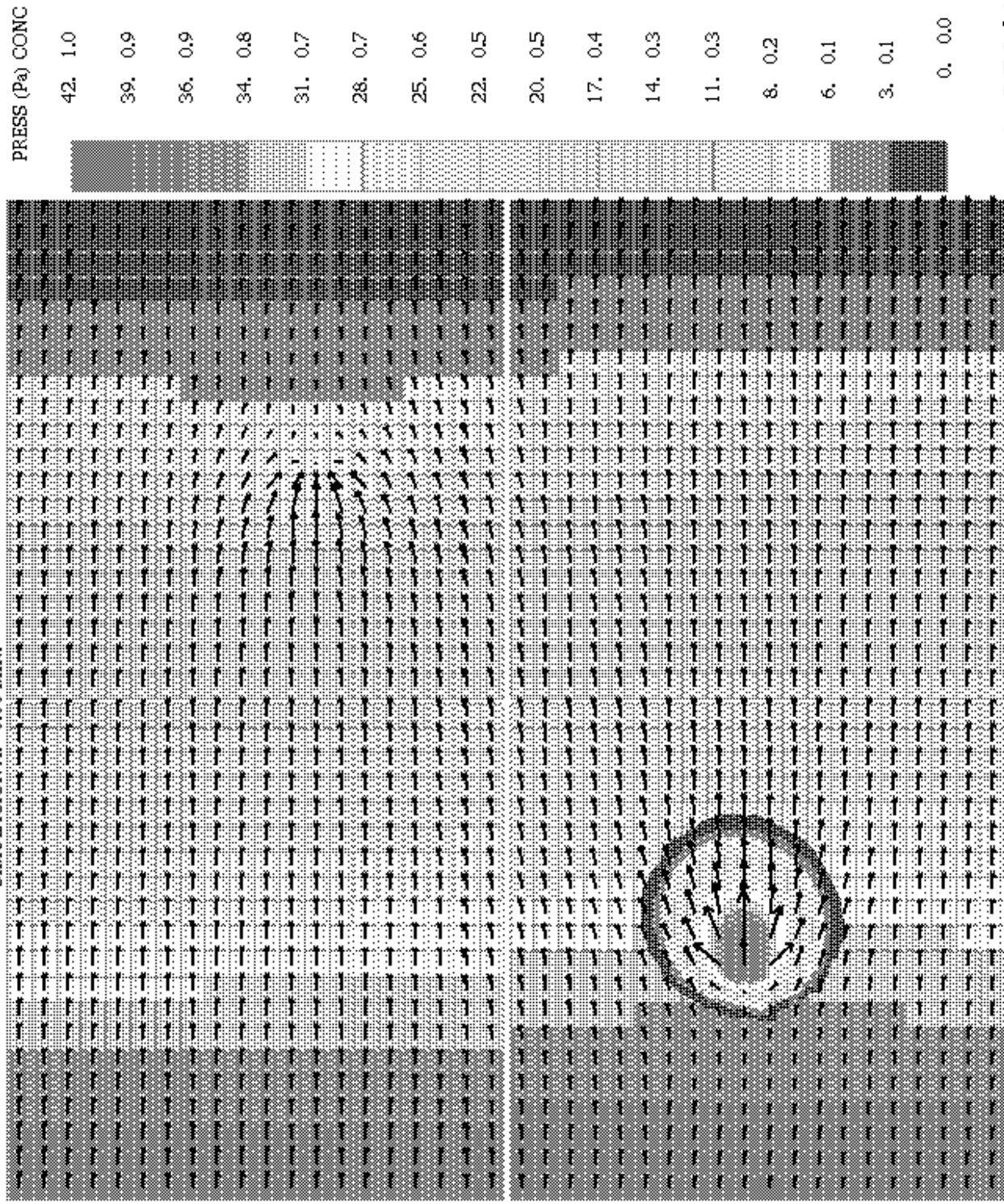


$t=150\Delta t$

SIMULACION A: 0.00 MIN.

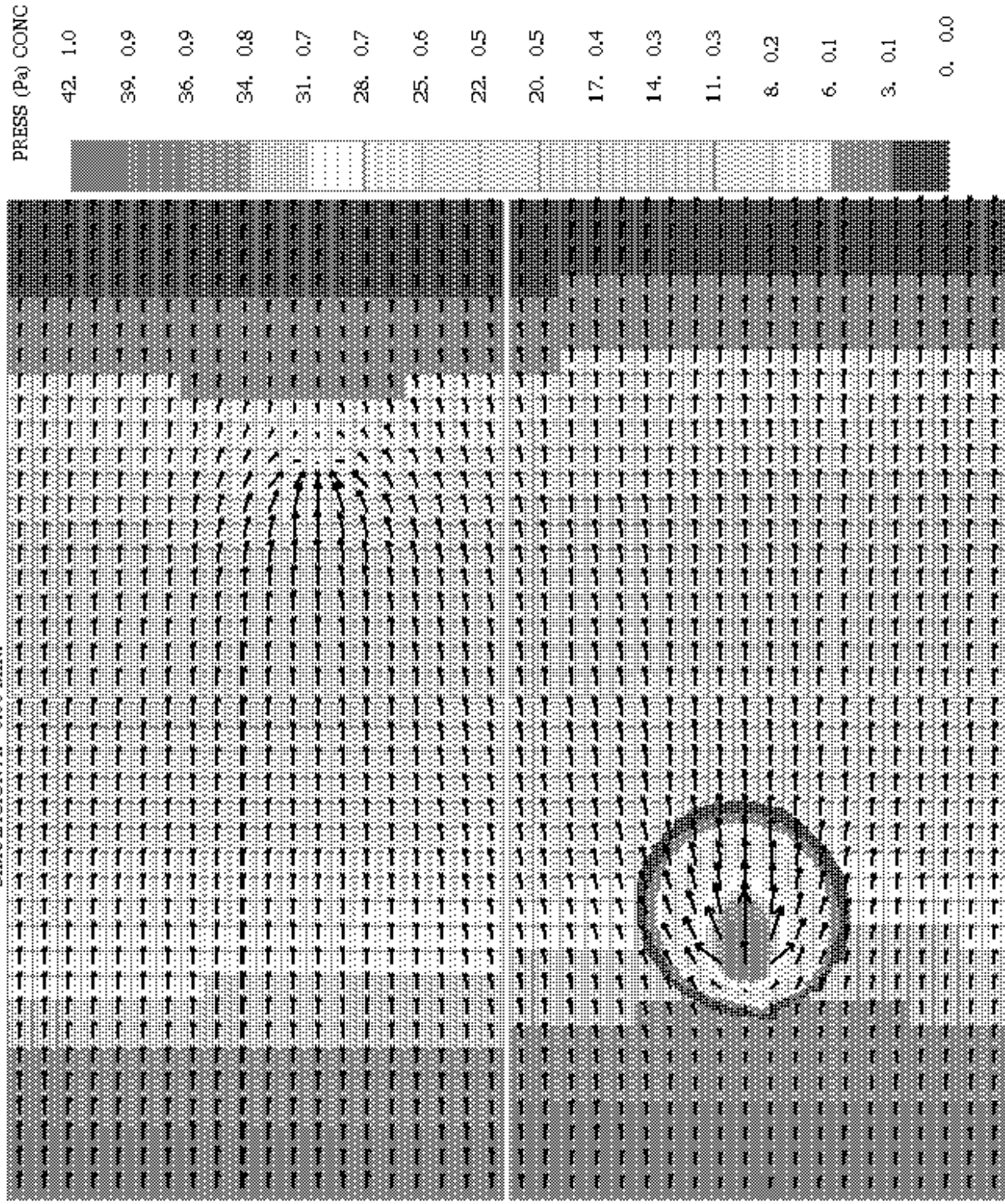


SIMULACION A: 0.00 MIN.



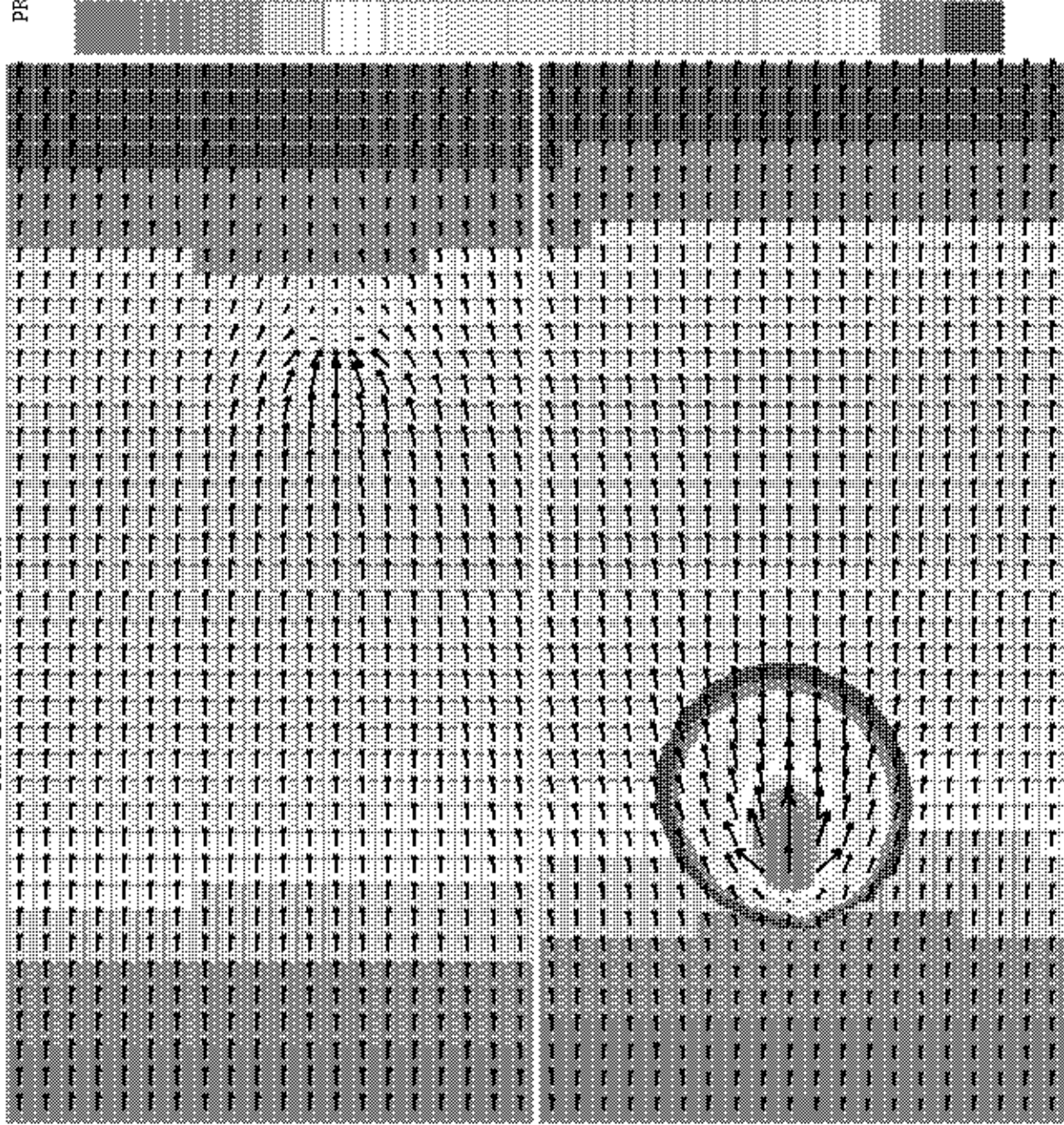
$t=250\Delta t$

SIMULACION A: 0.00 MIN.



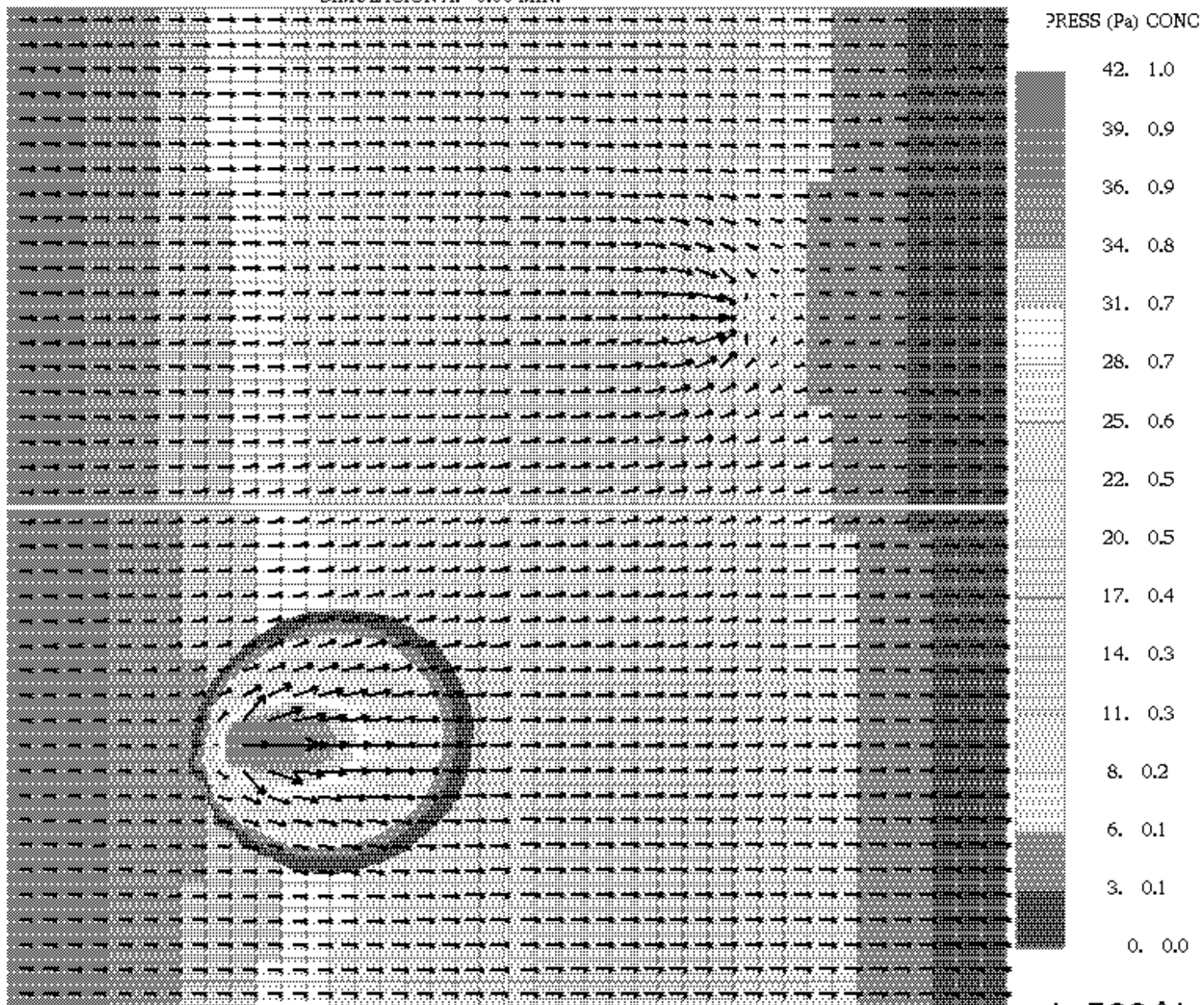
$T=300\Delta t$

SIMULACION A: 0.00 MIN.



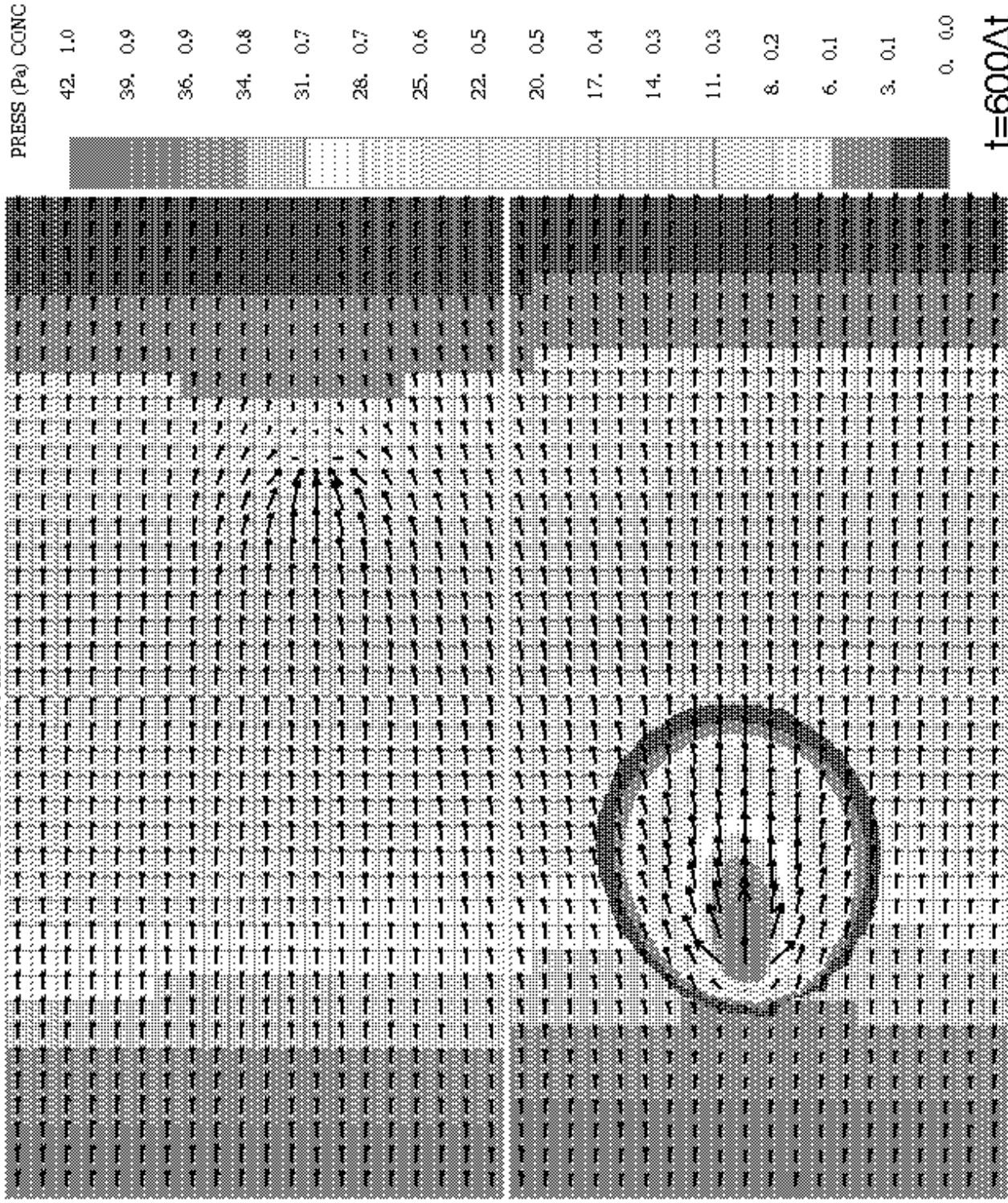
$t=400\Delta t$

SIMULACION A: 0.00 MIN.

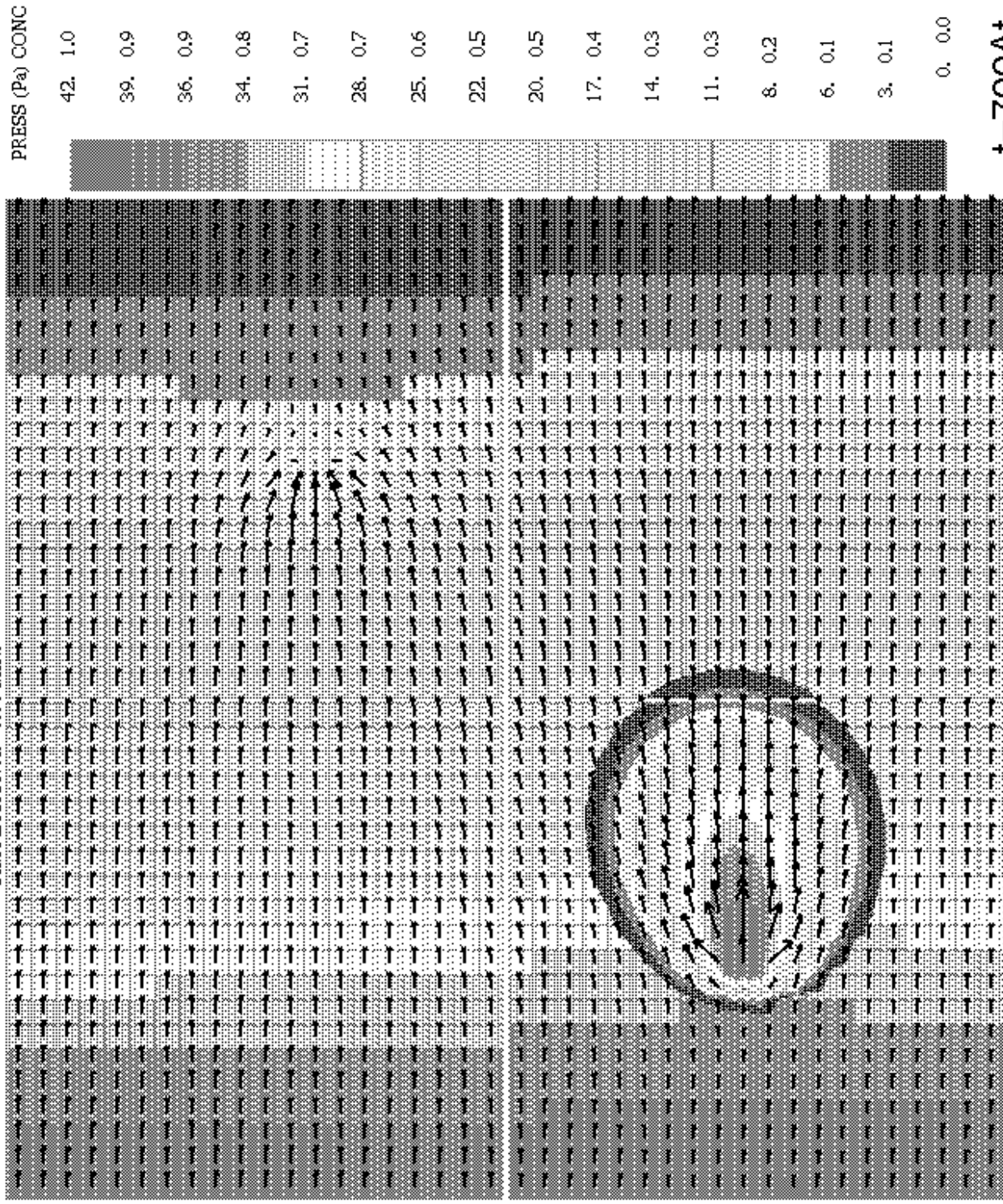


$t=500\Delta t$

SIMULACION A: 0.00 MIN.

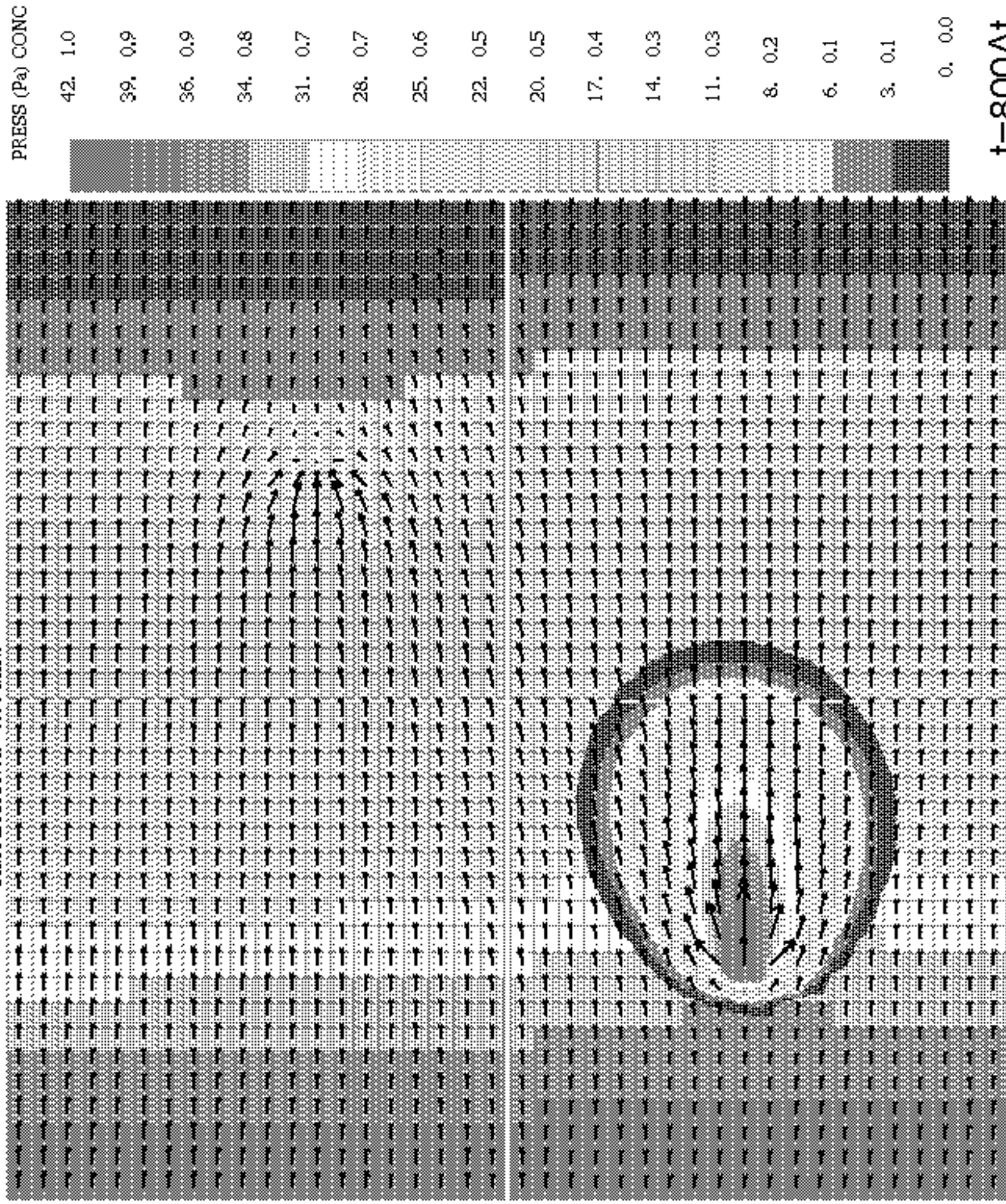


SIMULACION A: 0.00 MIN.

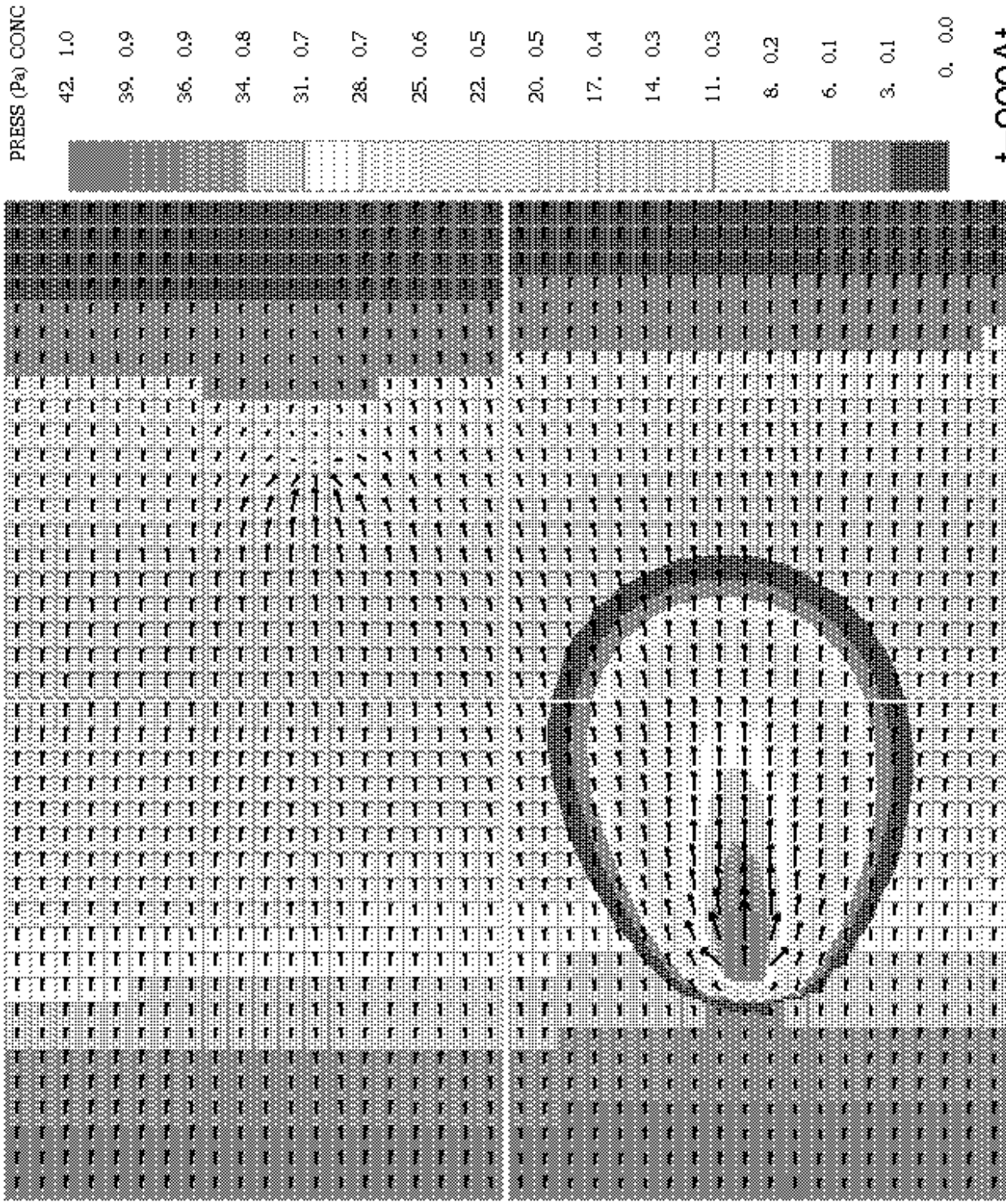




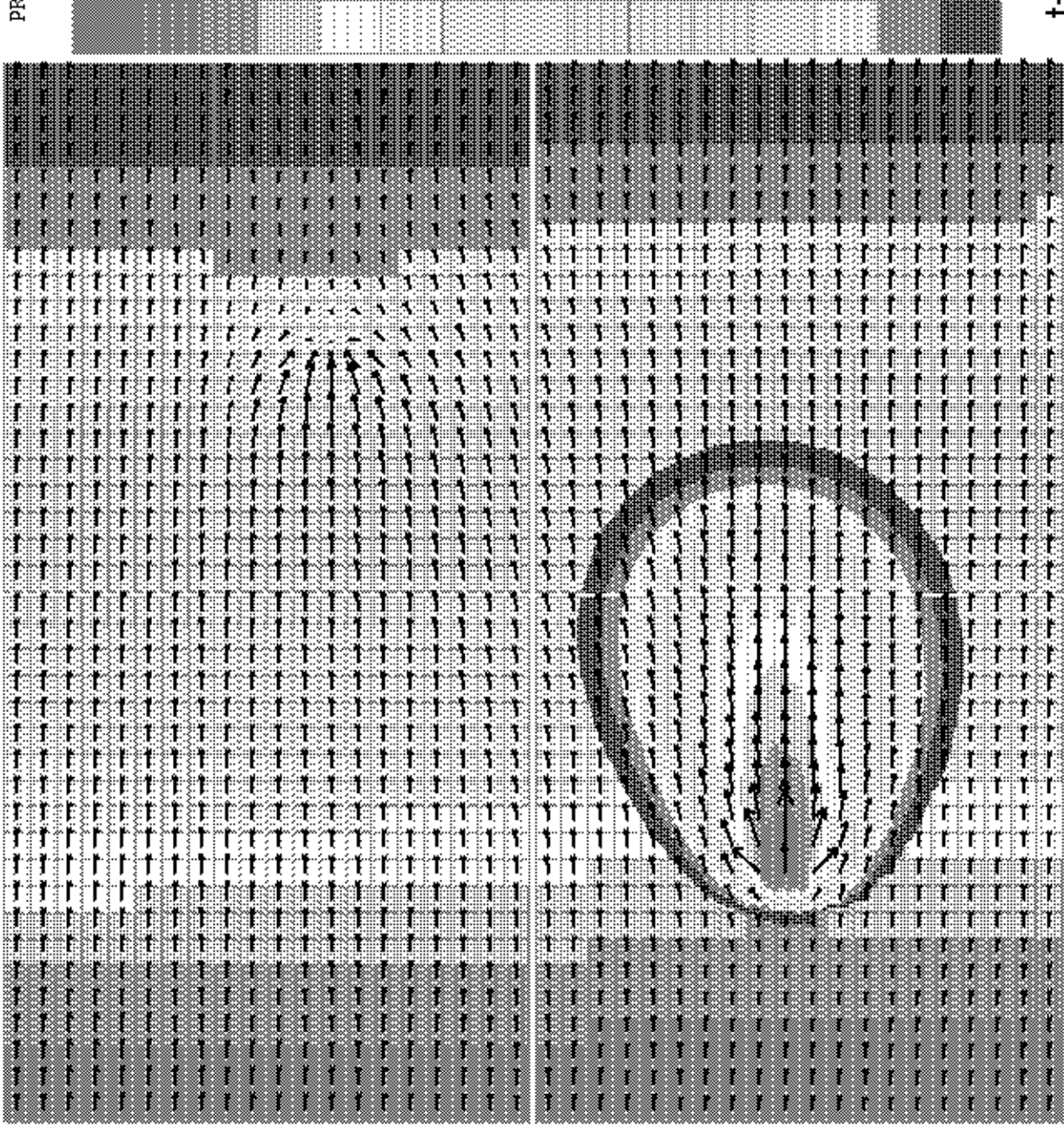
SIMULACION A: 0.00 MIN.



SIMULACION A: 0.01 MIN.

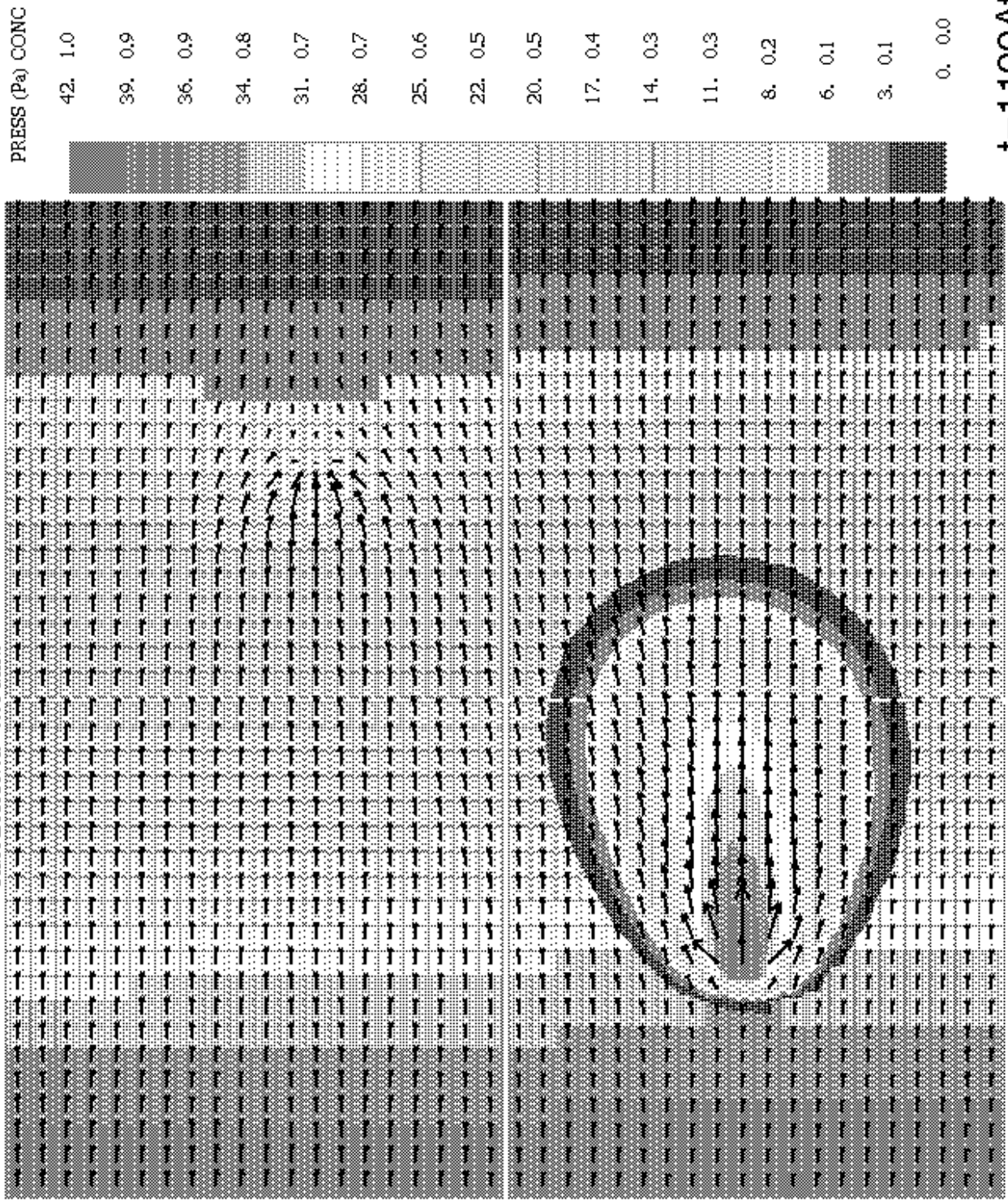


SIMULACION A: 0.01 MIN.



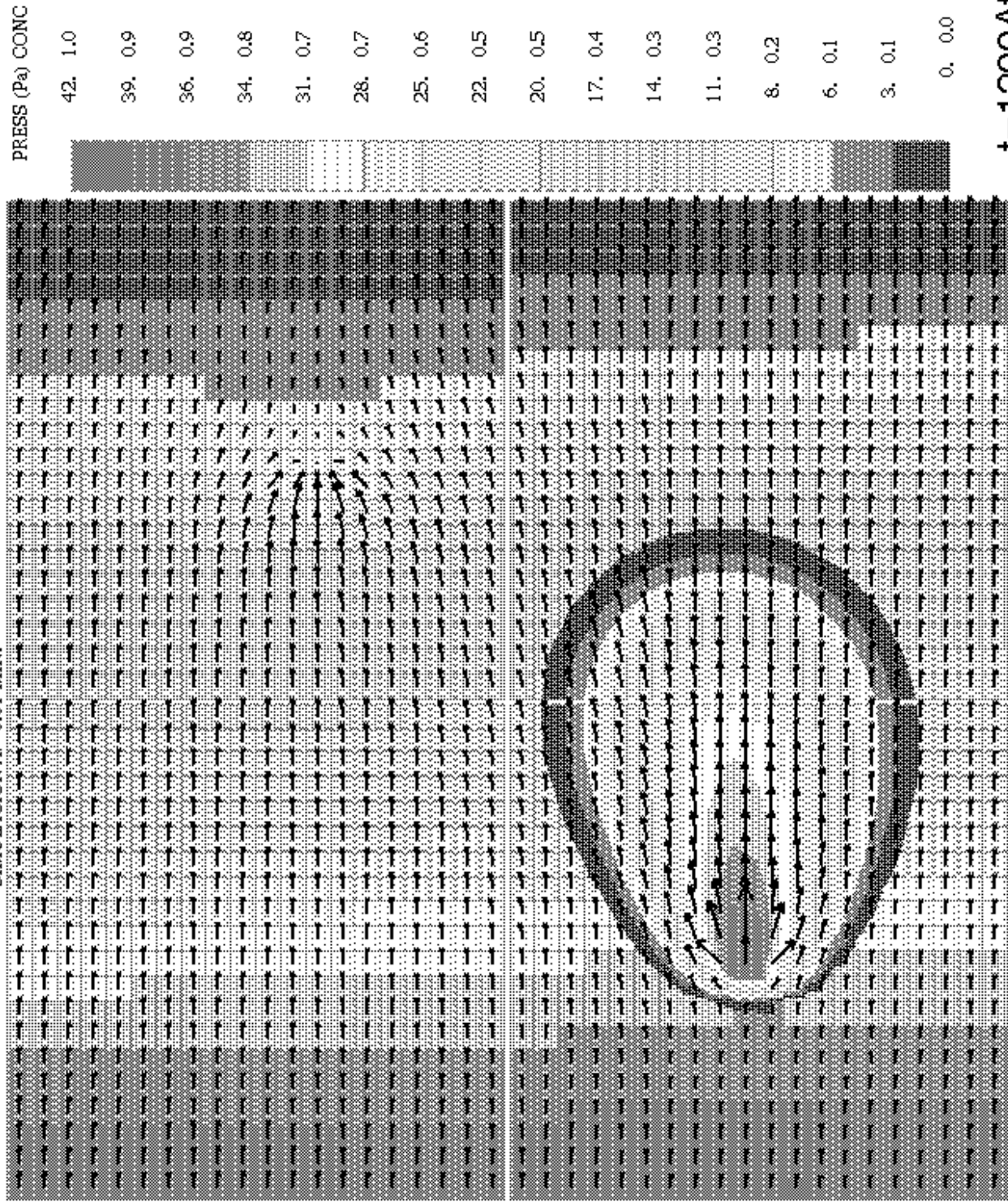
$t=1000\Delta t$

SIMULACION A: 0.01 MIN.



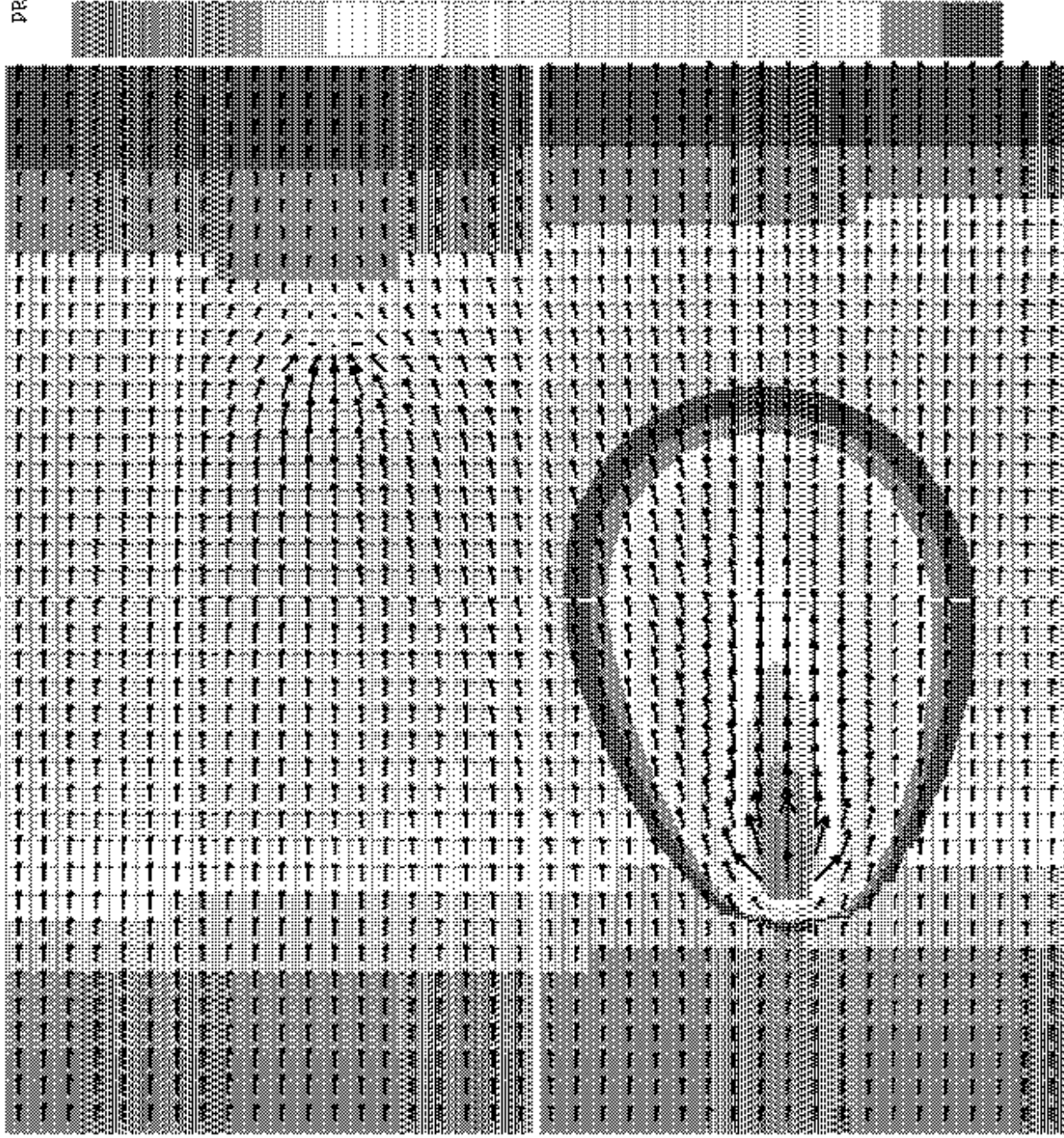
$t=1100\Delta t$

SIMULACION A: 0.01 MIN.



$t=1200\Delta t$

SIMULACION A: 0.01 MIN.



PRESS (Pa) CONTC

42, 1.0

39, 0.9

36, 0.8

34, 0.6

31, 0.7

28, 0.7

25, 0.6

22, 0.5

20, 0.5

17, 0.4

14, 0.3

11, 0.3

8, 0.2

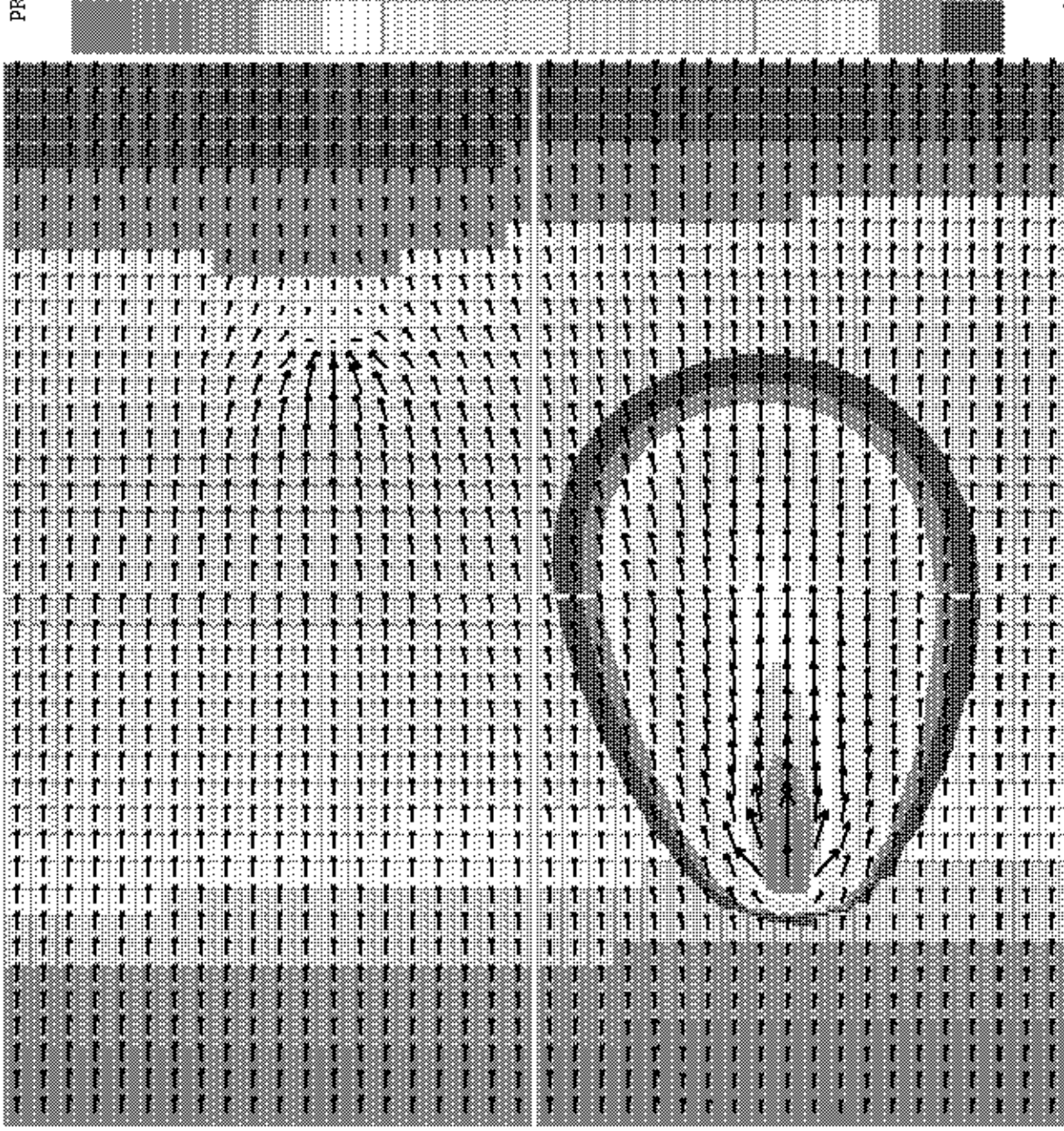
6, 0.1

3, 0.1

0, 0.0

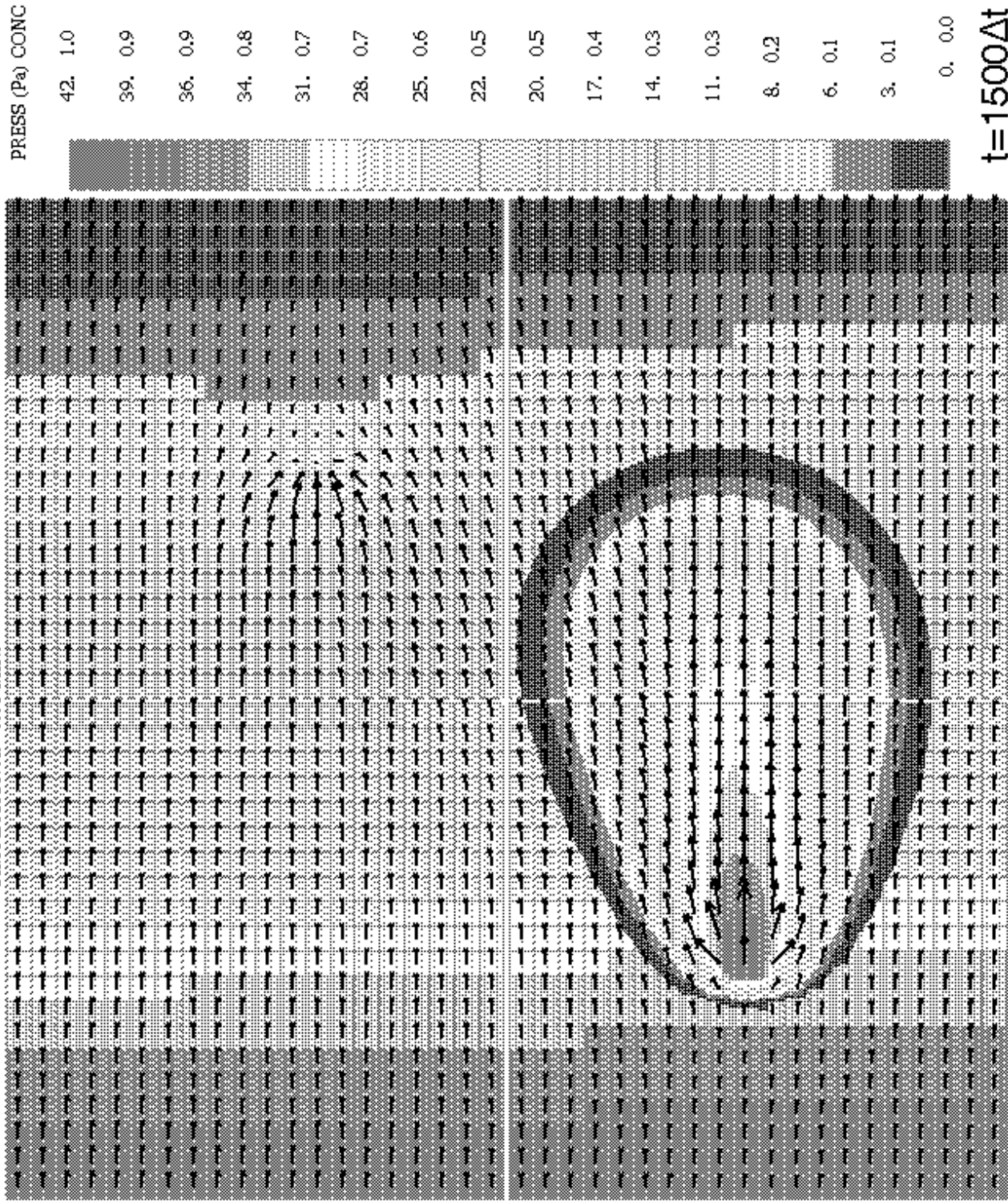
t=1300Δt

SIMULACION A: 0.01 MIN.



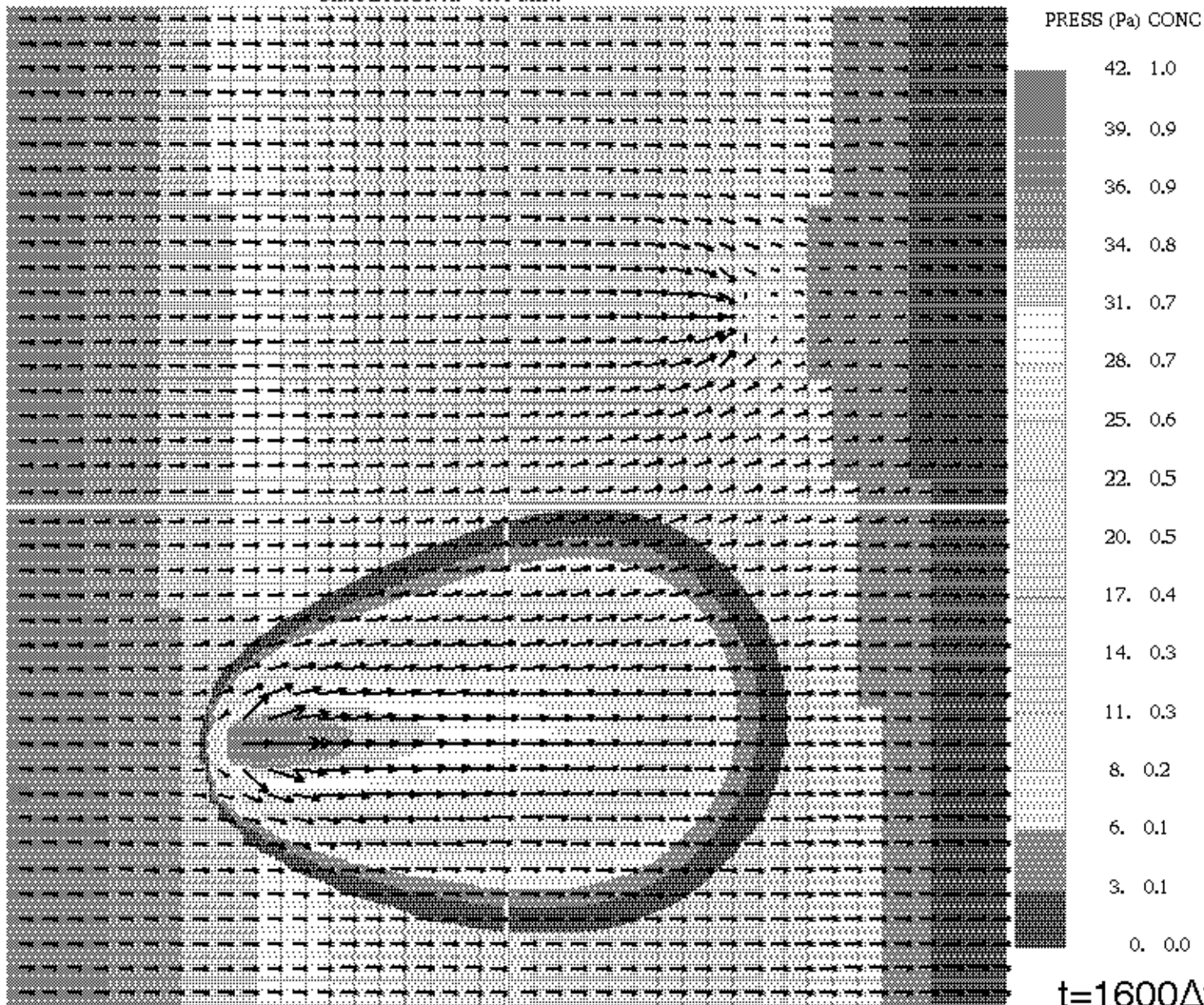
t=1400Δt

SIMULACION A: 0.01 MIN.



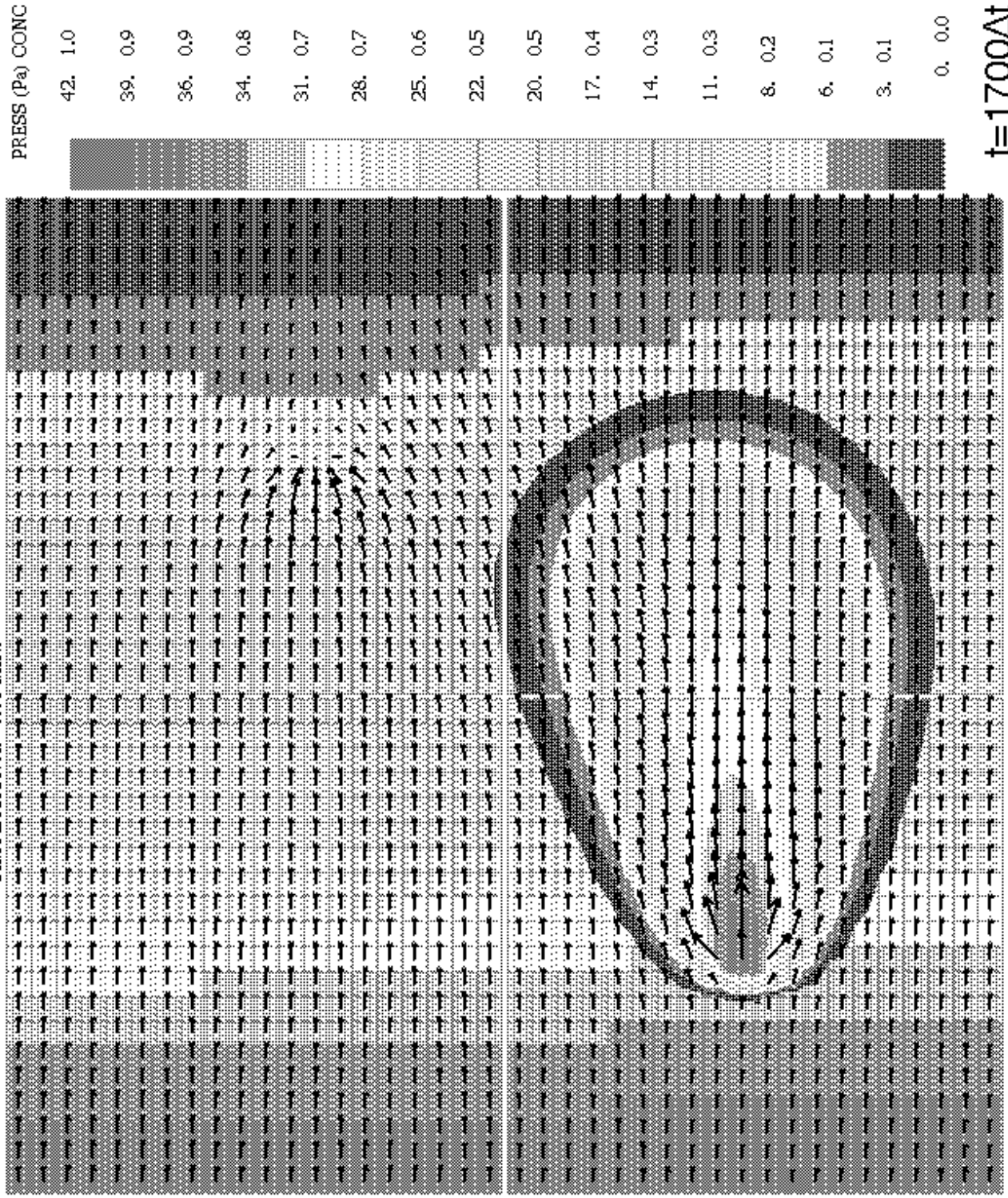


SIMULACION A: 0.01 MIN.

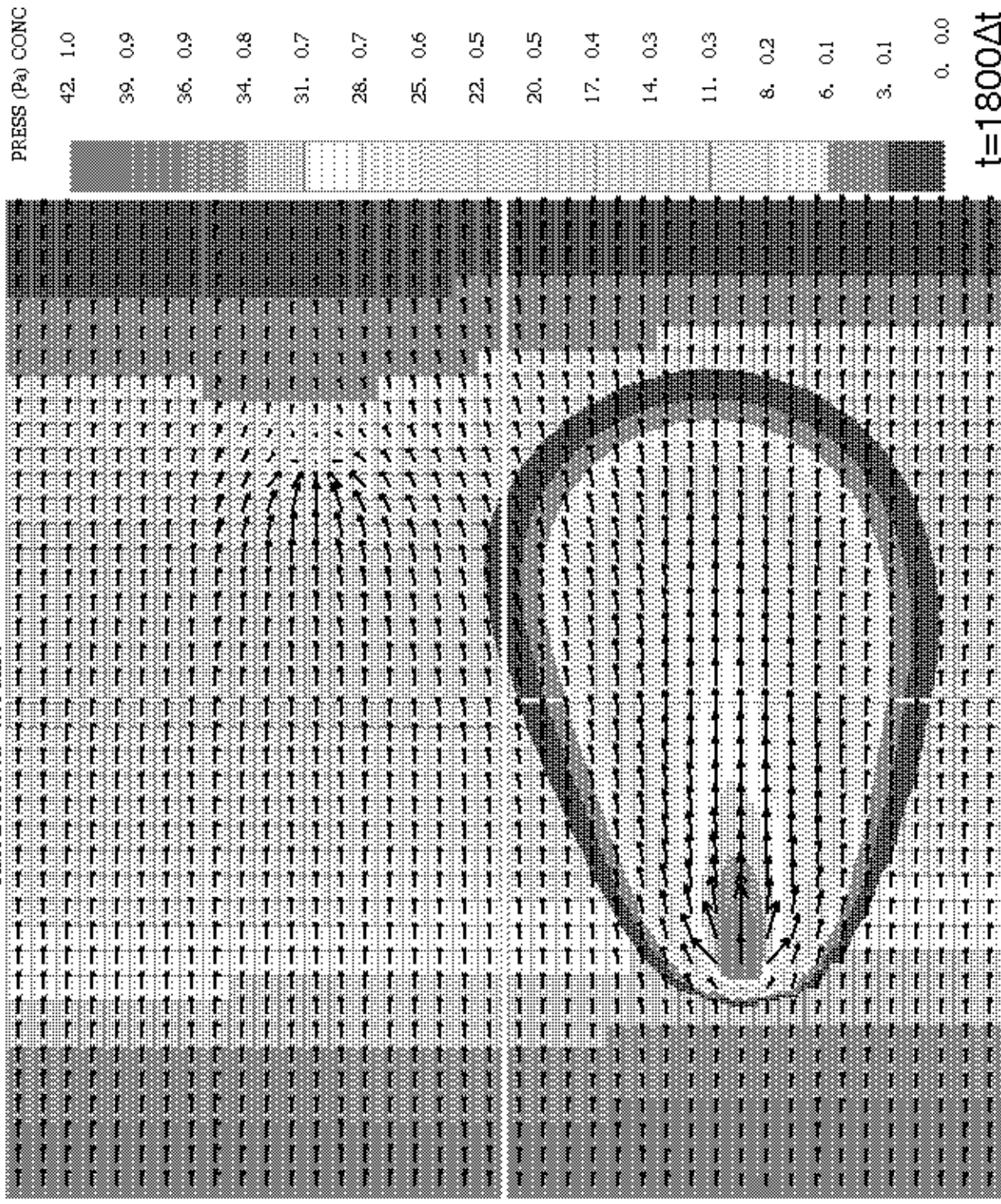


$t=1600\Delta t$

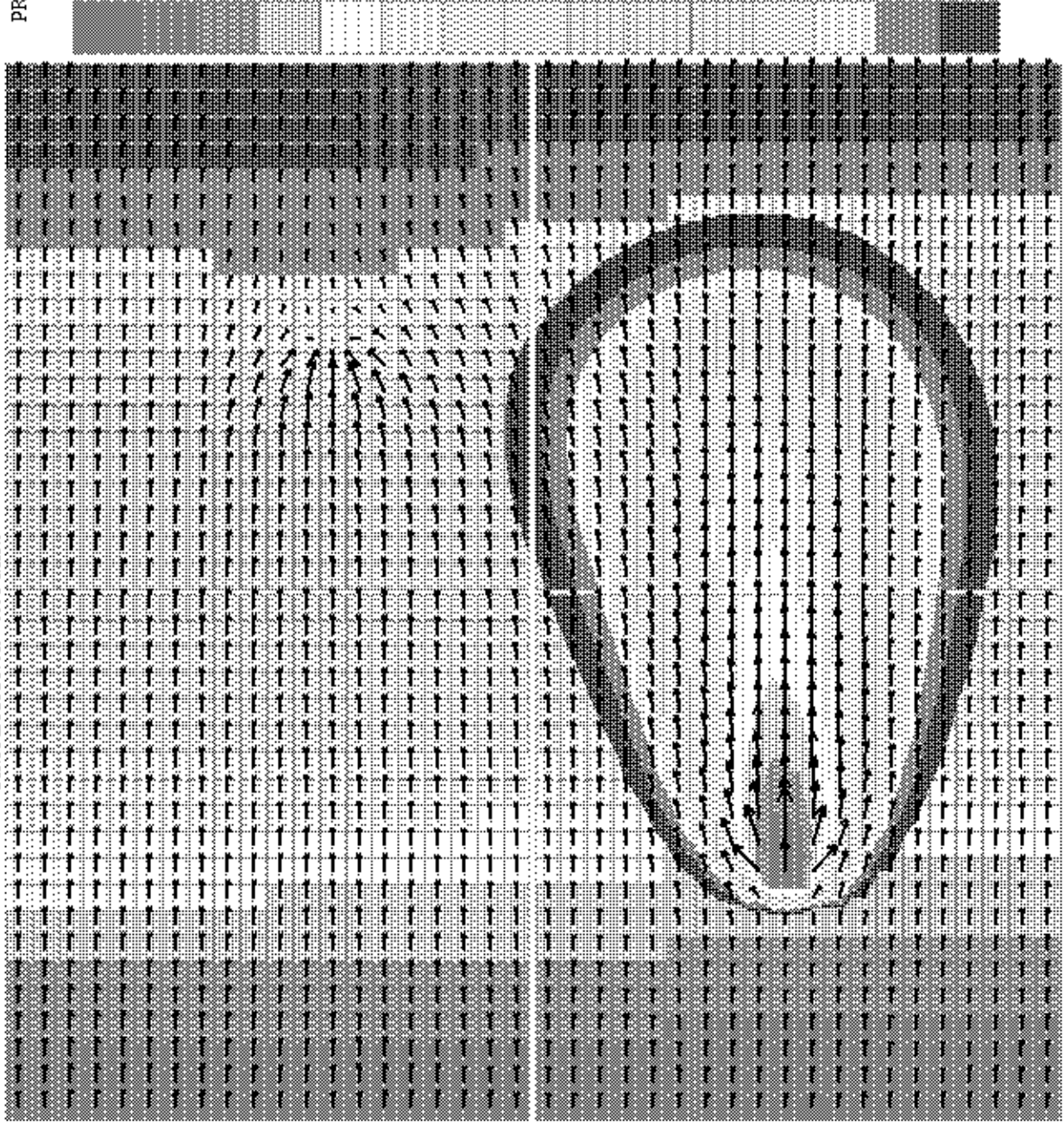
SIMULACION A: 0.01 MIN.



SIMULACION A: 0.01 MIN.

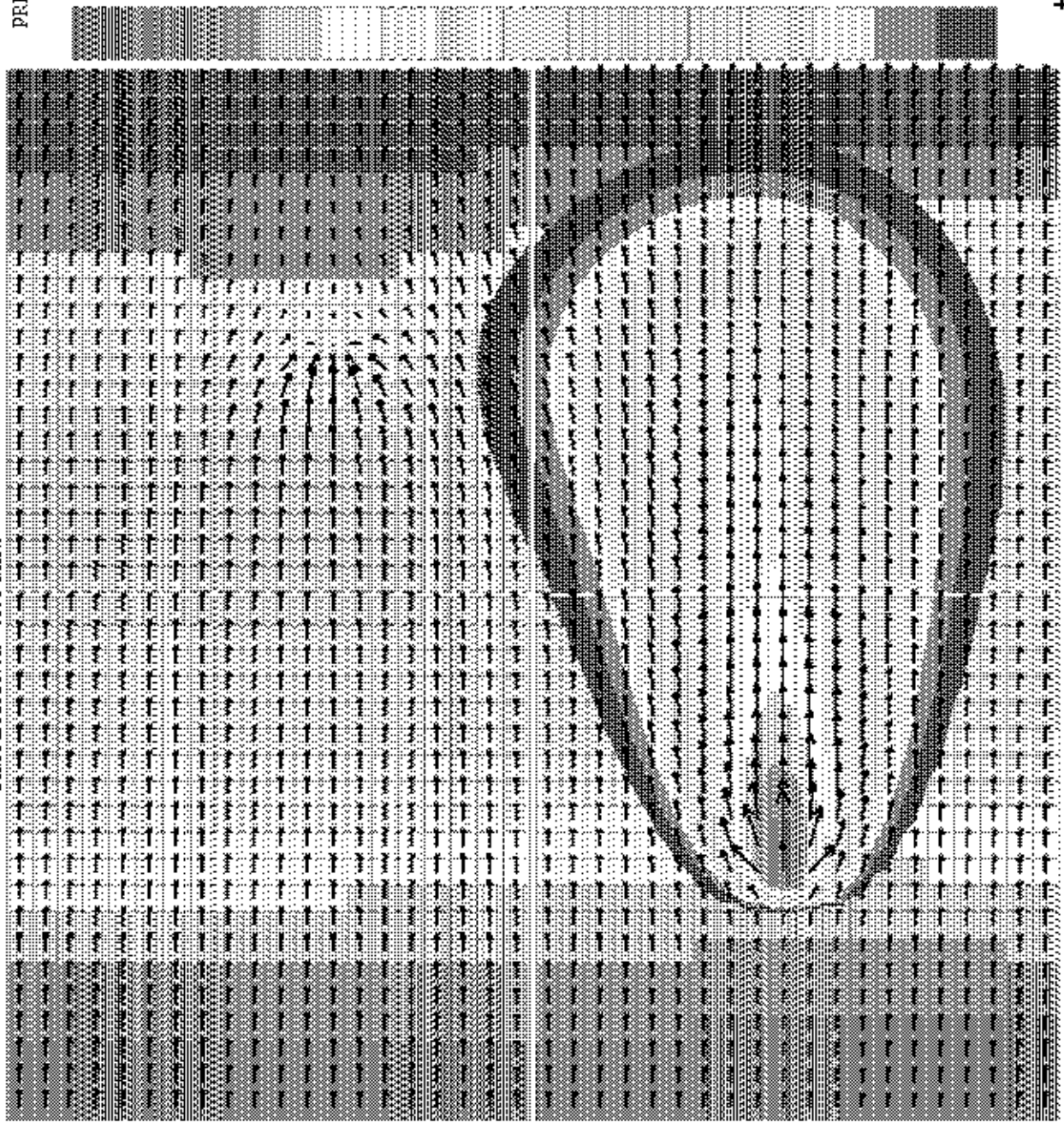


SIMULACION A: 0.01 MIN.



$t=1900\Delta t$

SIMULACION A: 0.01 MIN.

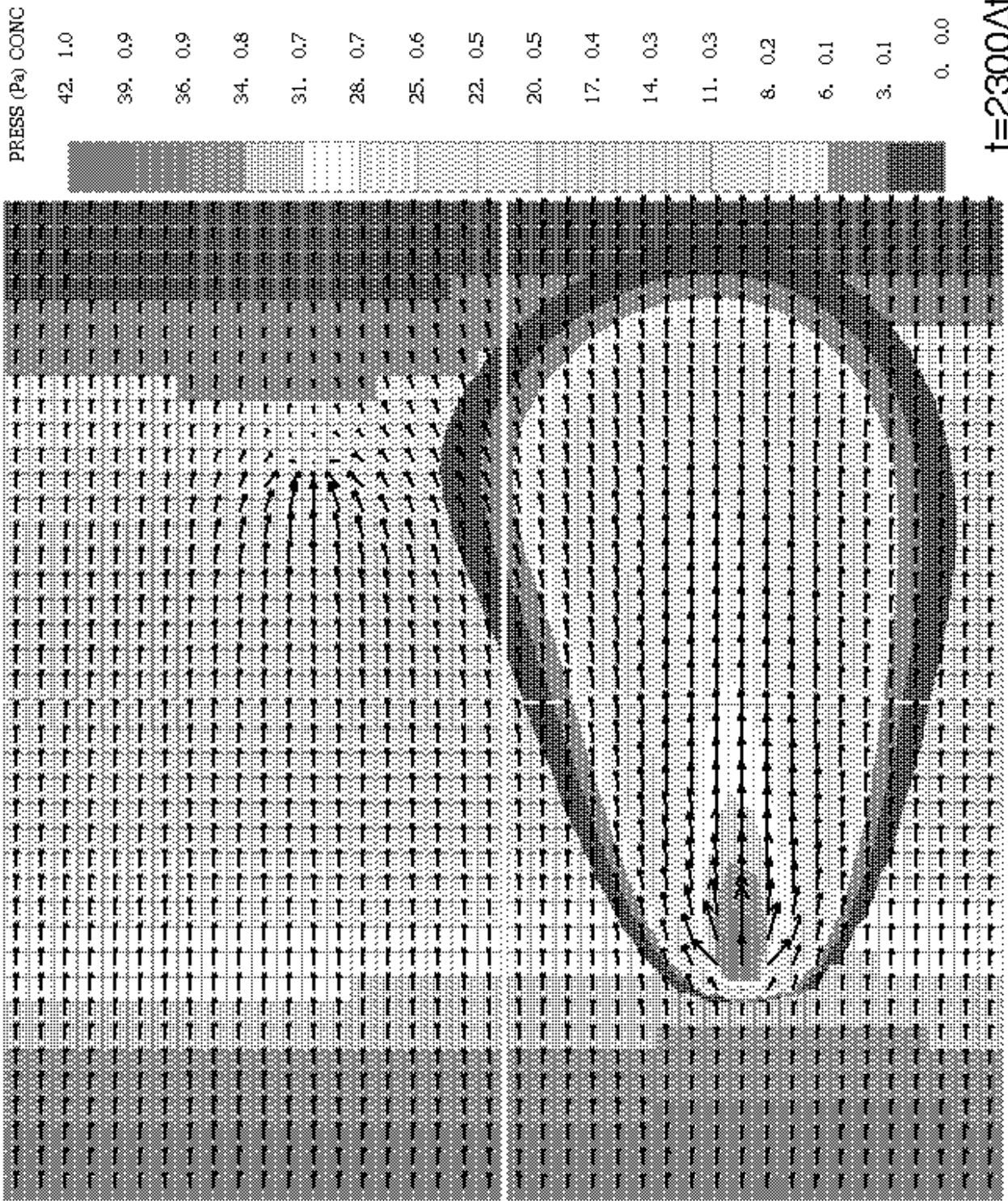


PRESS (Pa) CONC

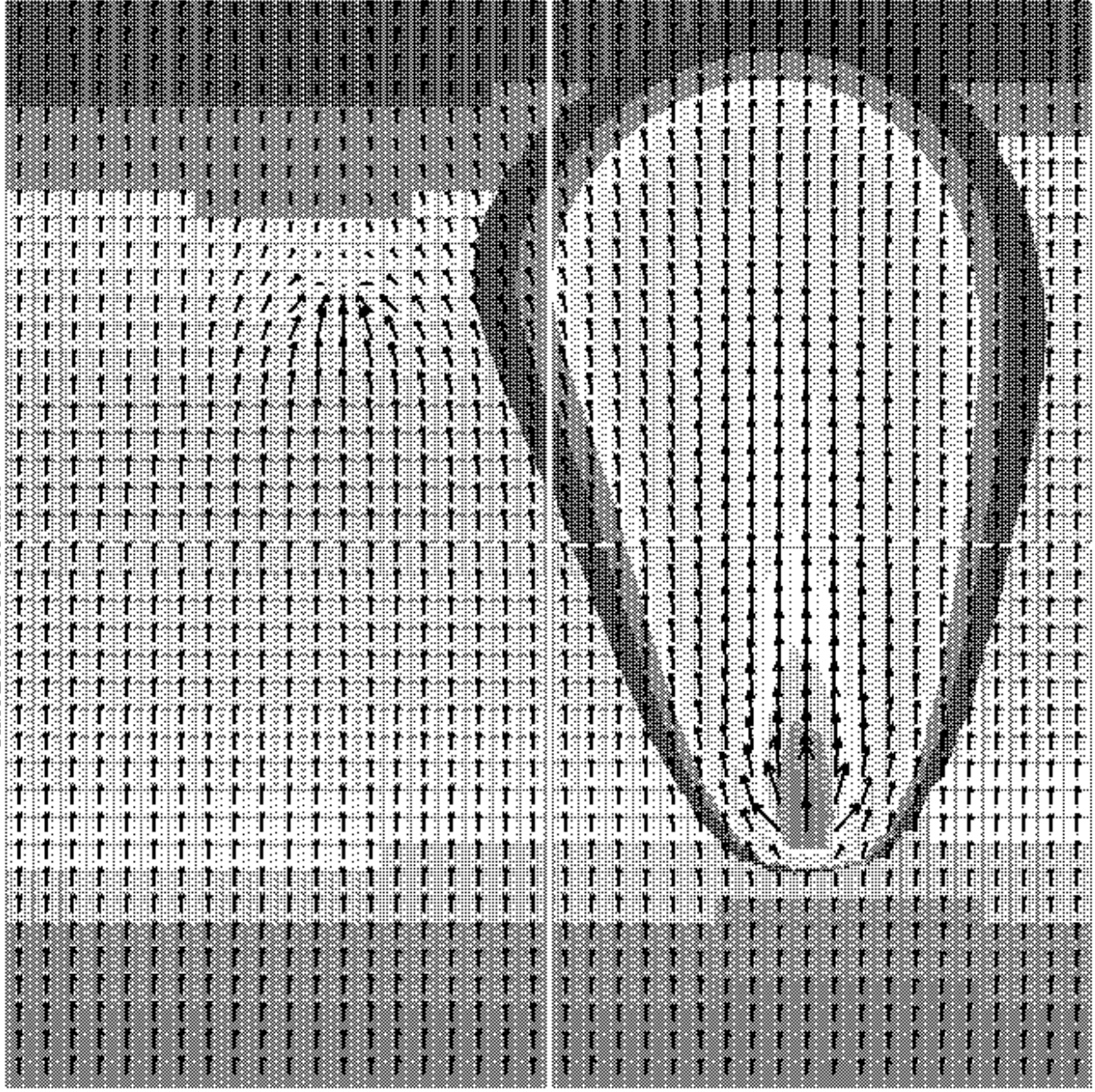
- 42. 1.0
- 39. 0.9
- 36. 0.9
- 34. 0.8
- 31. 0.7
- 28. 0.7
- 25. 0.6
- 22. 0.5
- 20. 0.5
- 17. 0.4
- 14. 0.3
- 11. 0.5
- 8. 0.2
- 6. 0.1
- 3. 0.1
- 0. 0.0

t=2200Δt

SIMULACION A: 0.01 MIN.



SIMULACION A: 0.01 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

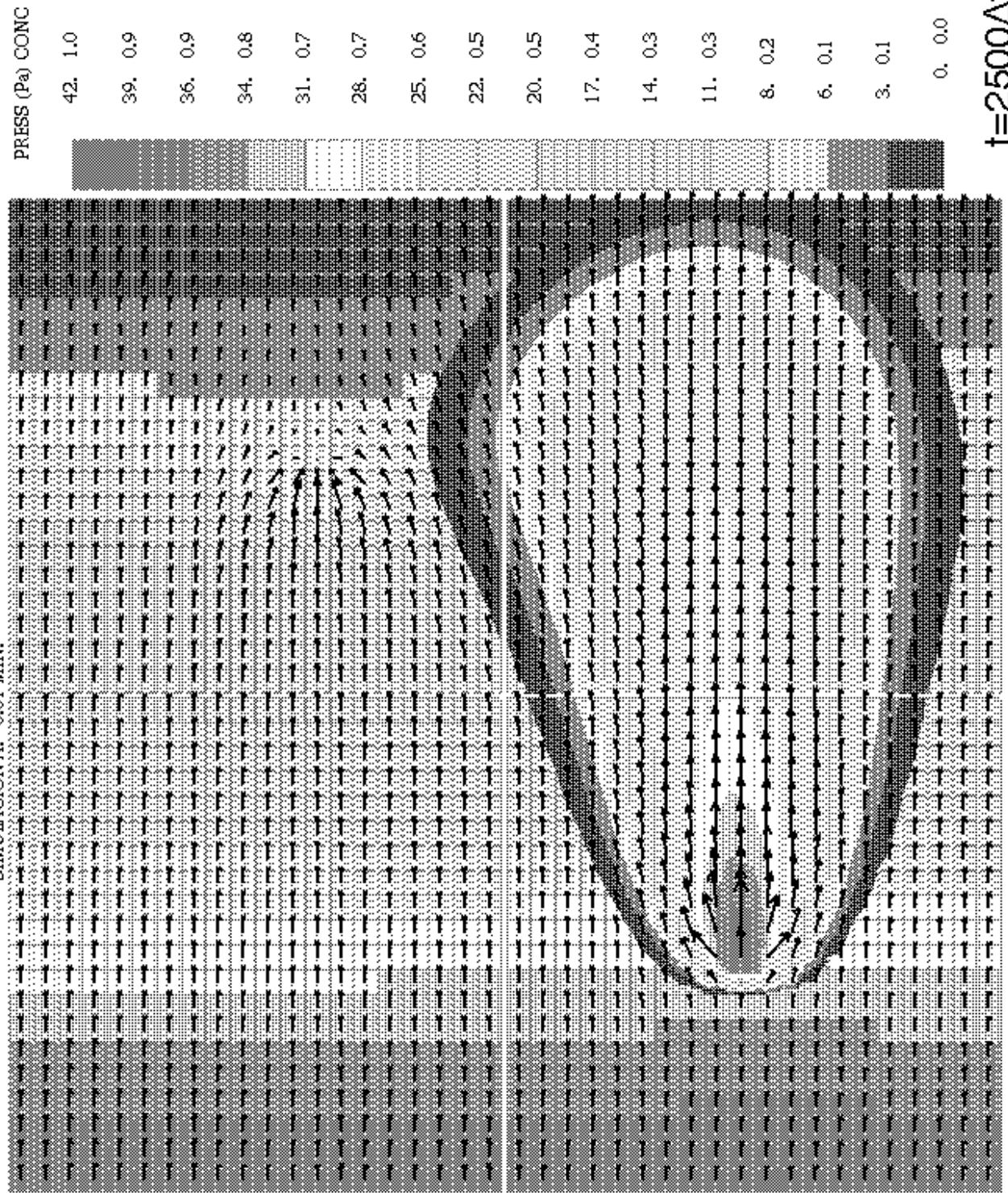
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

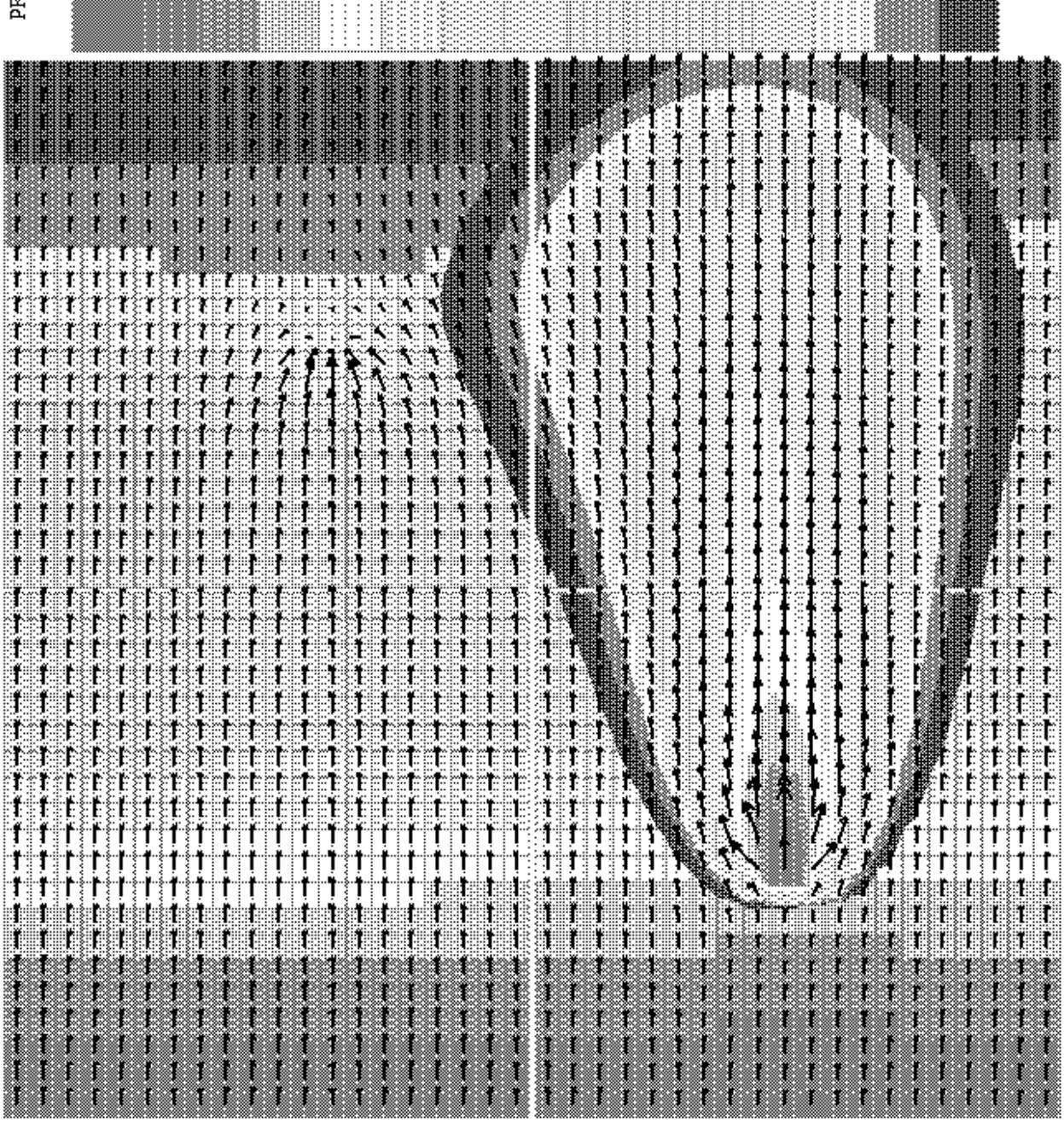
t=2400Δt

SIMULACION A: 0.01 MIN.





SIMULACION A: 0.01 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

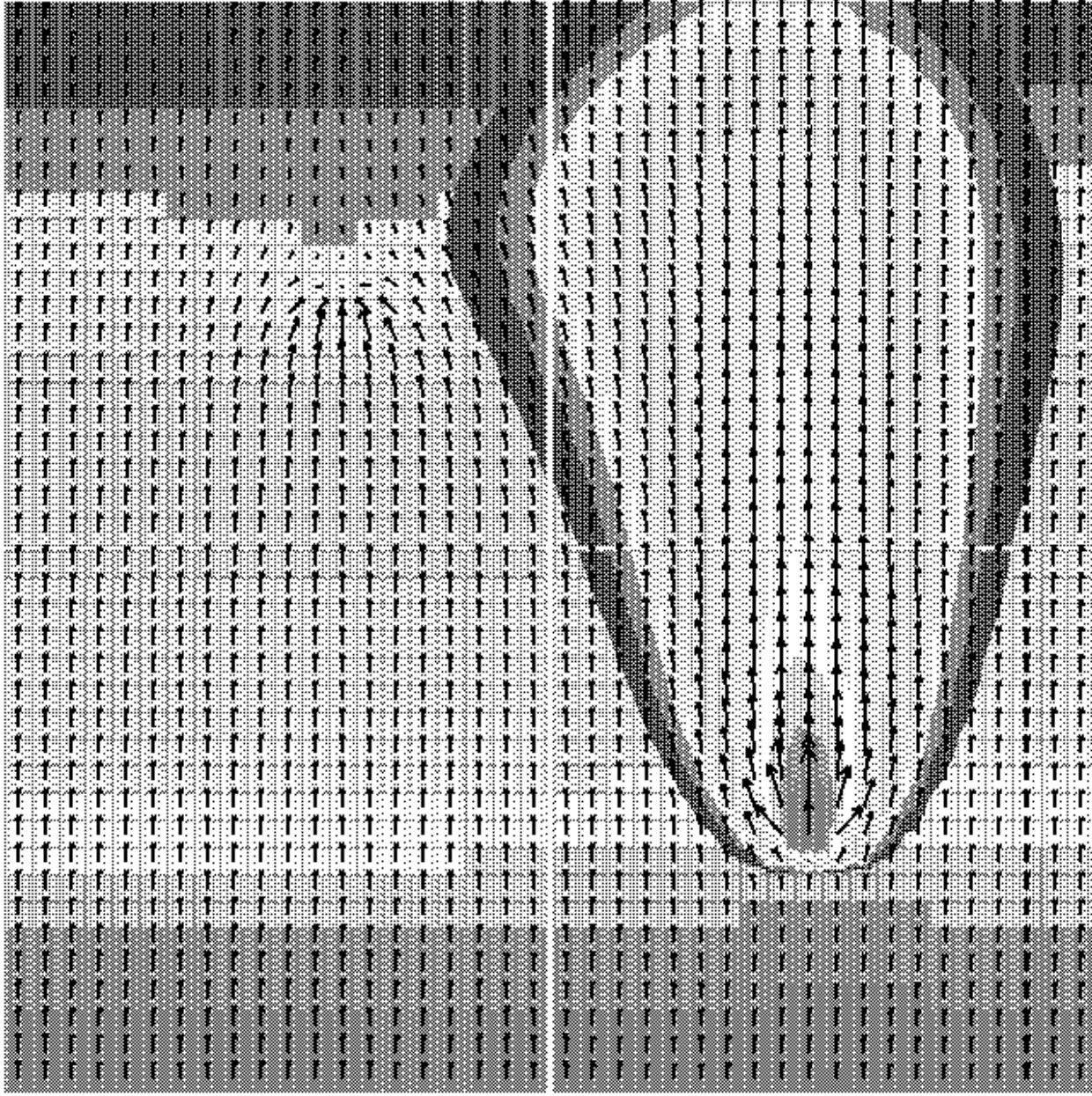
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

$t=2600\Delta t$

SIMULACION A: 0.01 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

t=2700Δt

SIMULACION A: 0.01 MIN.

PRESS (Pa) CCNG

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

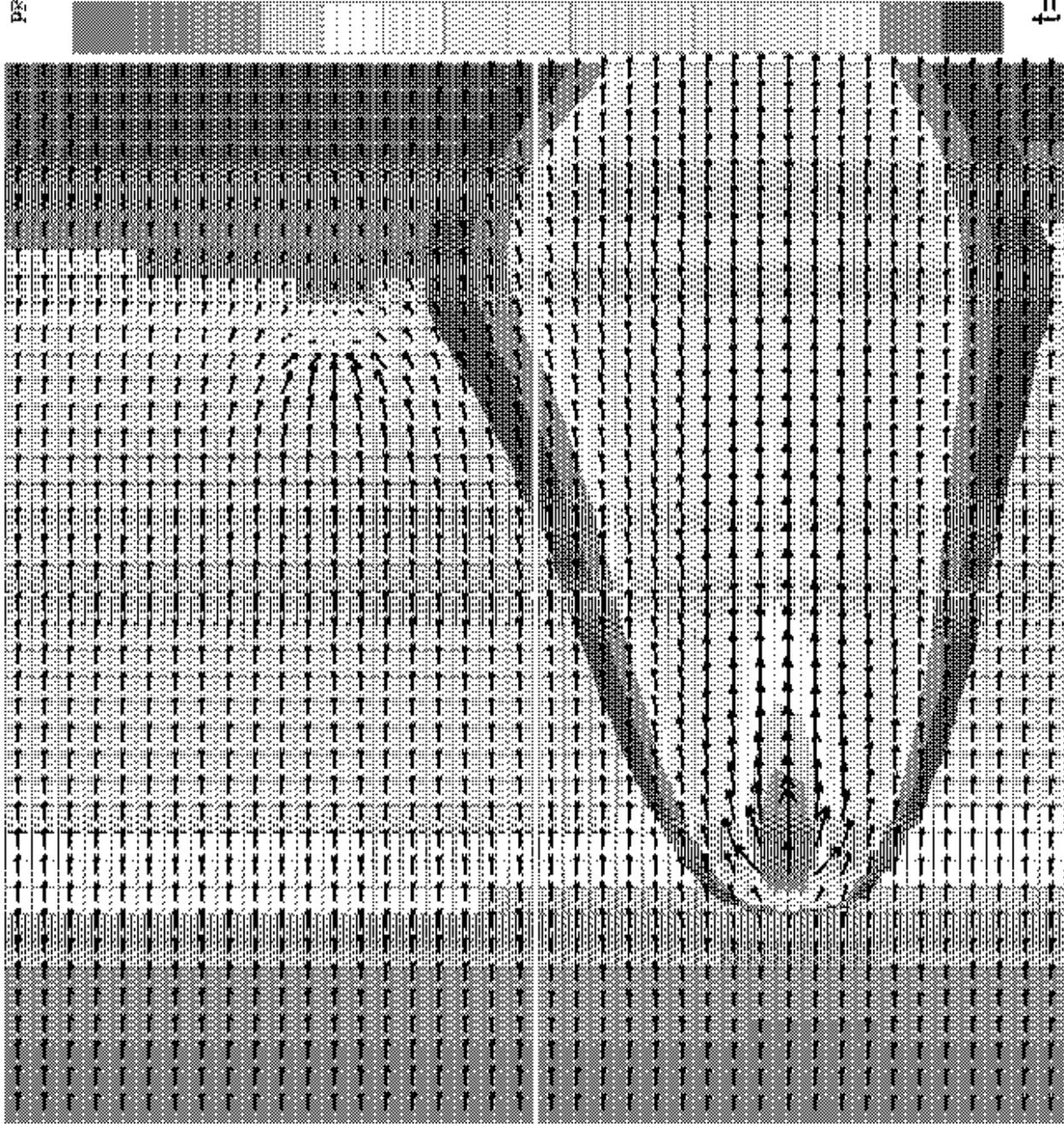
6. 0.2

6. 0.1

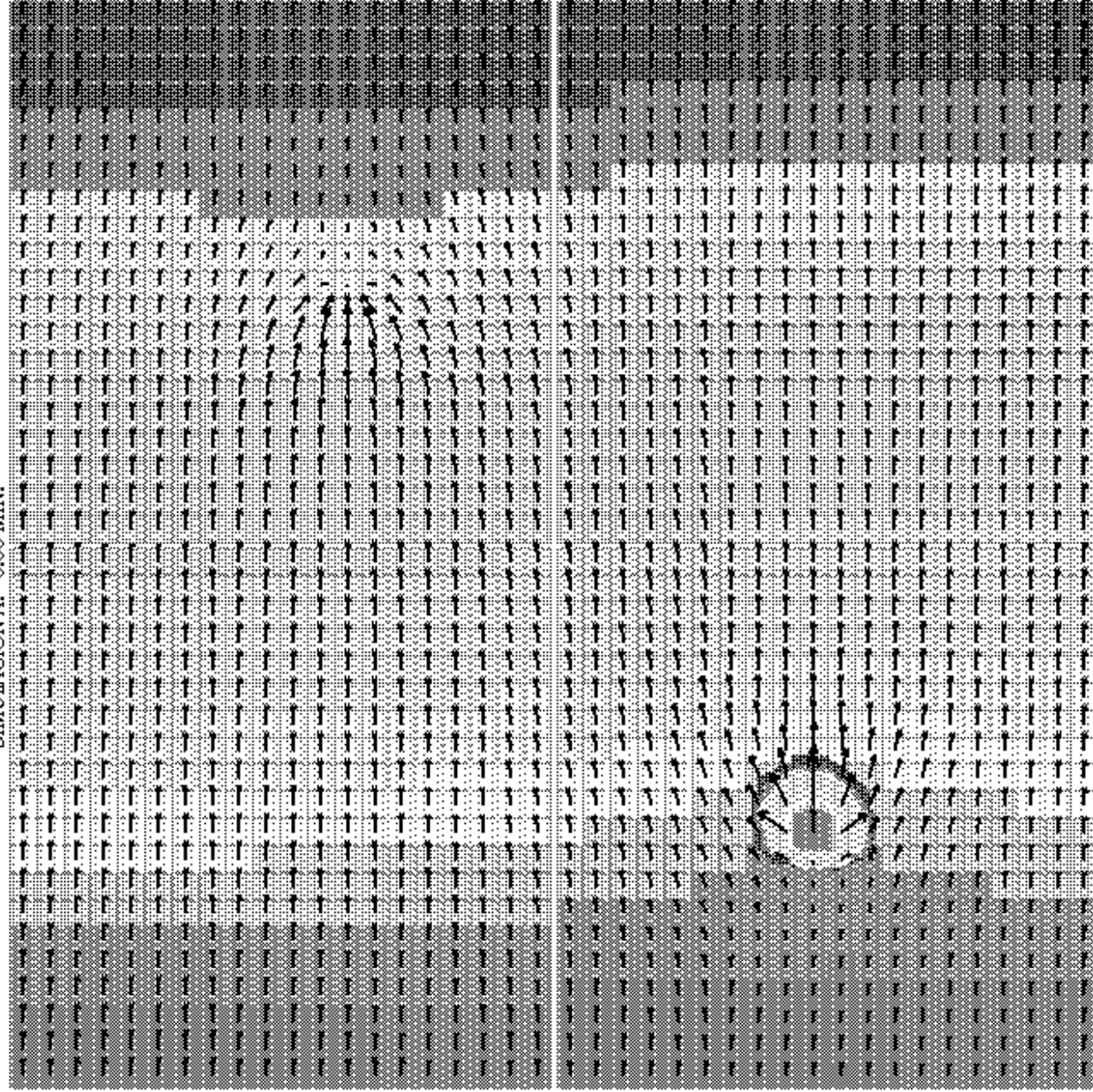
3. 0.1

0. 0.0

t=2900Δt



SIMULACION A: 0.00 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

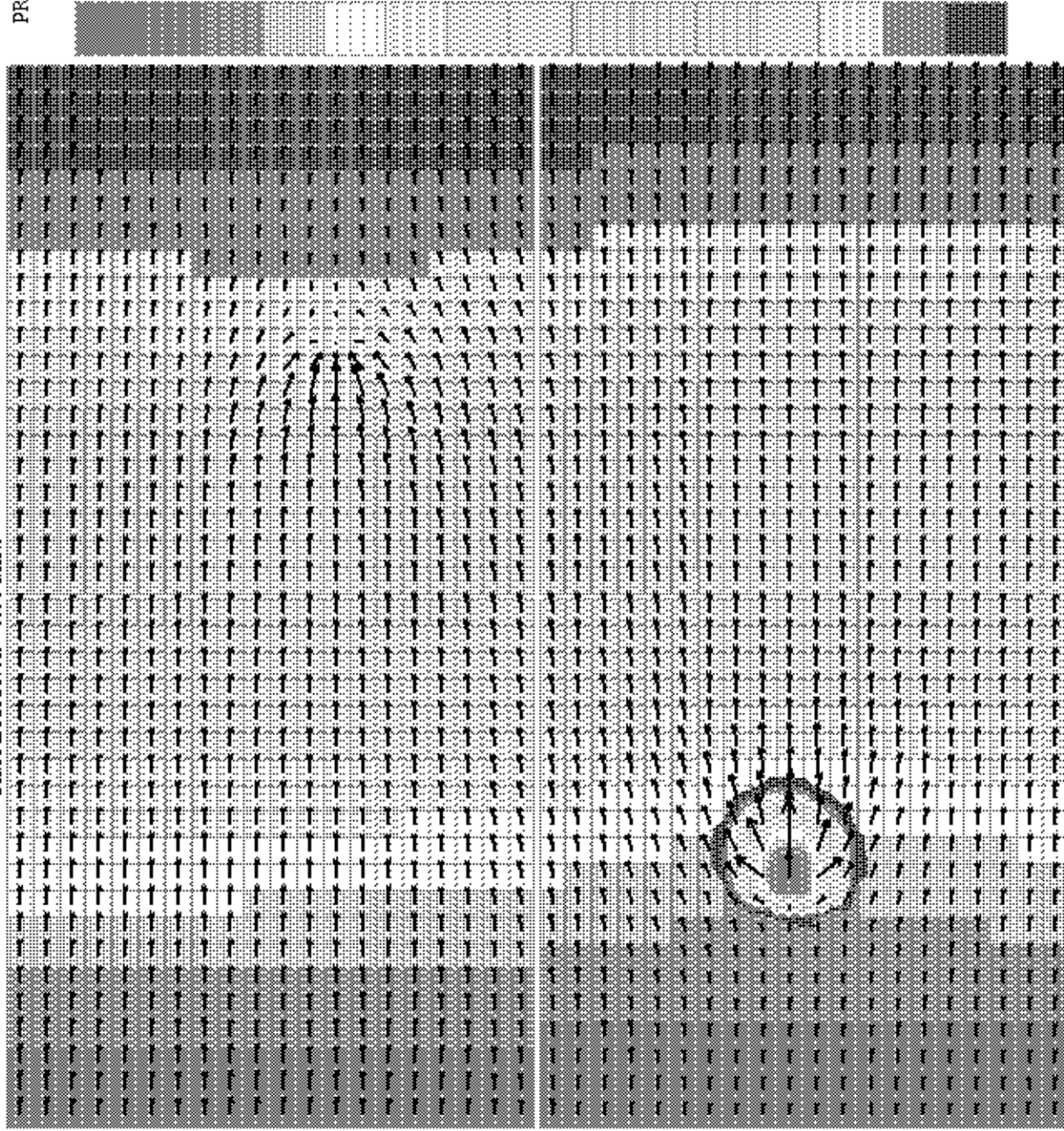
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

T=50Δt

SIMULACION A: 0.00 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

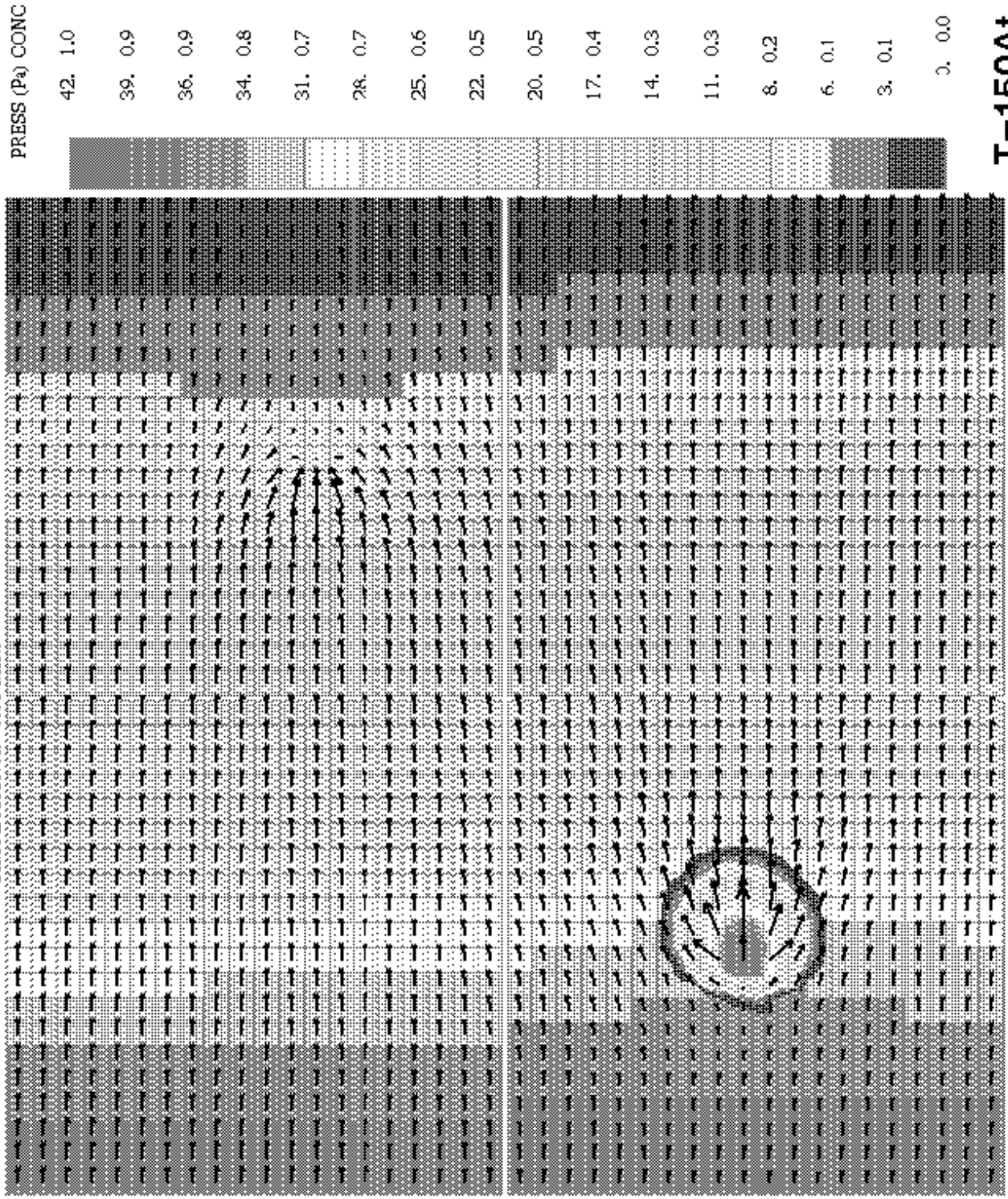
6. 0.1

3. 0.1

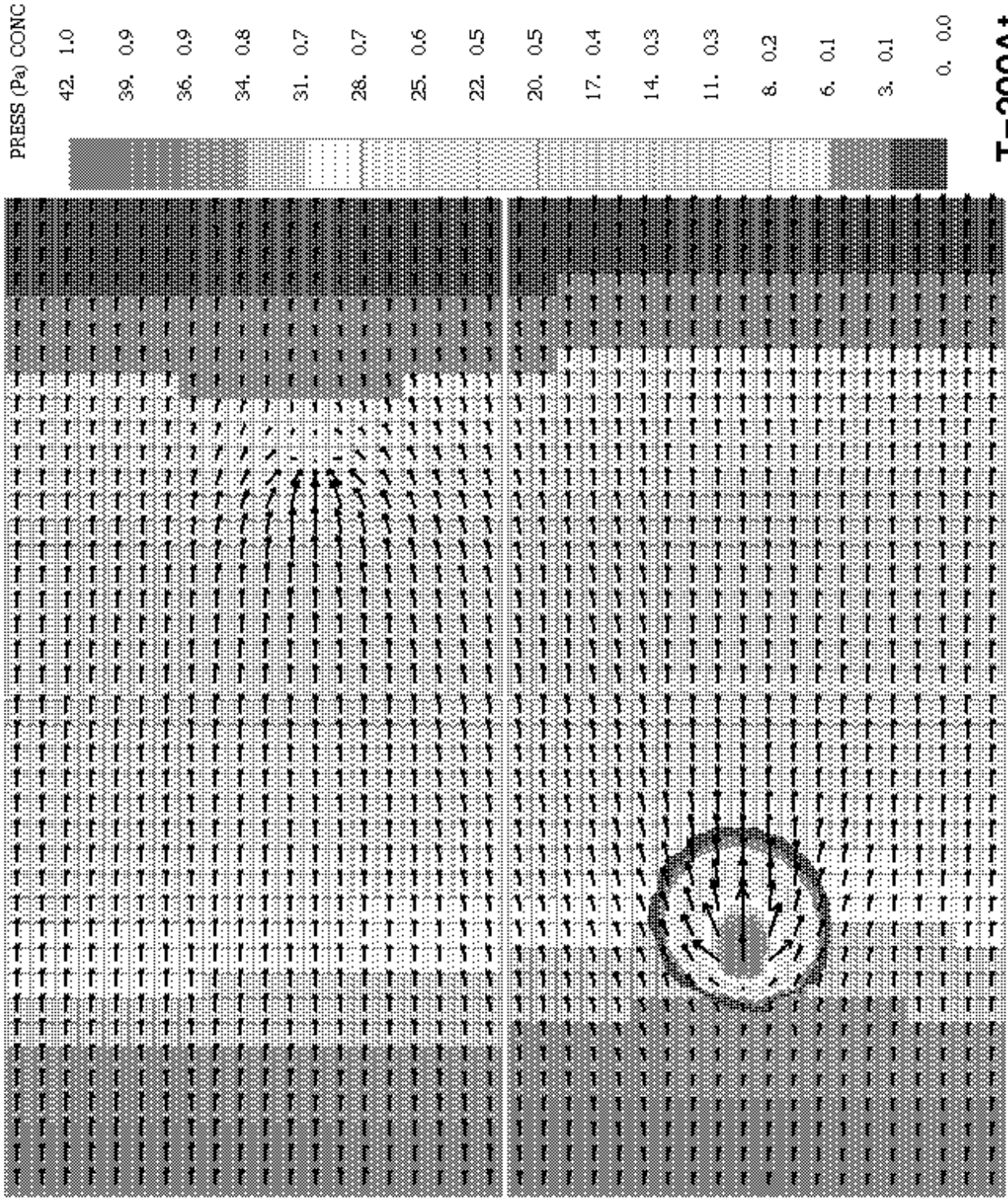
0. 0.0

$T=100\Delta t$

SIMULACION A: 0.01 MIN.

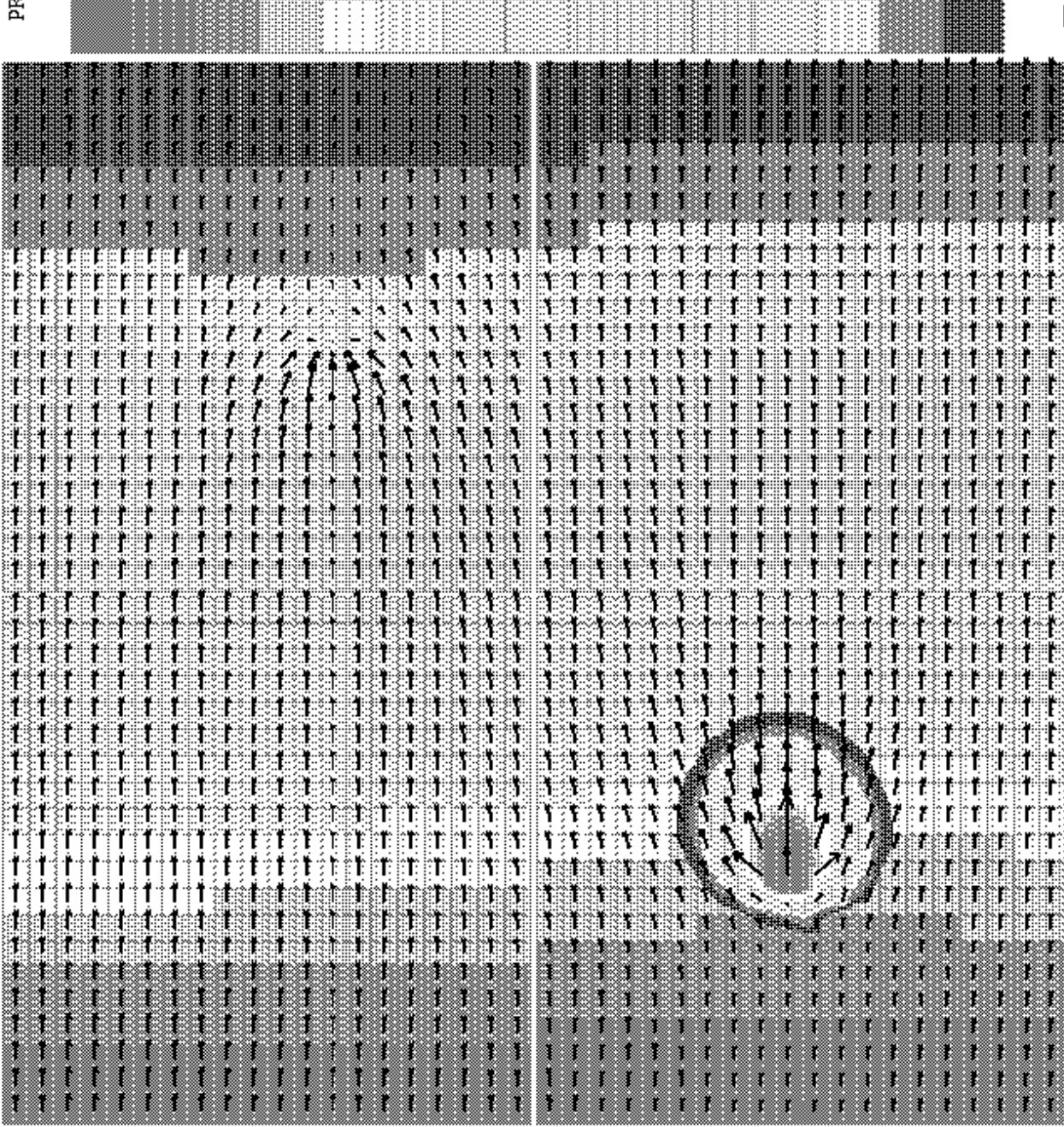


SIMULACION A: 0.01 MIN.



$T=200\Delta t$

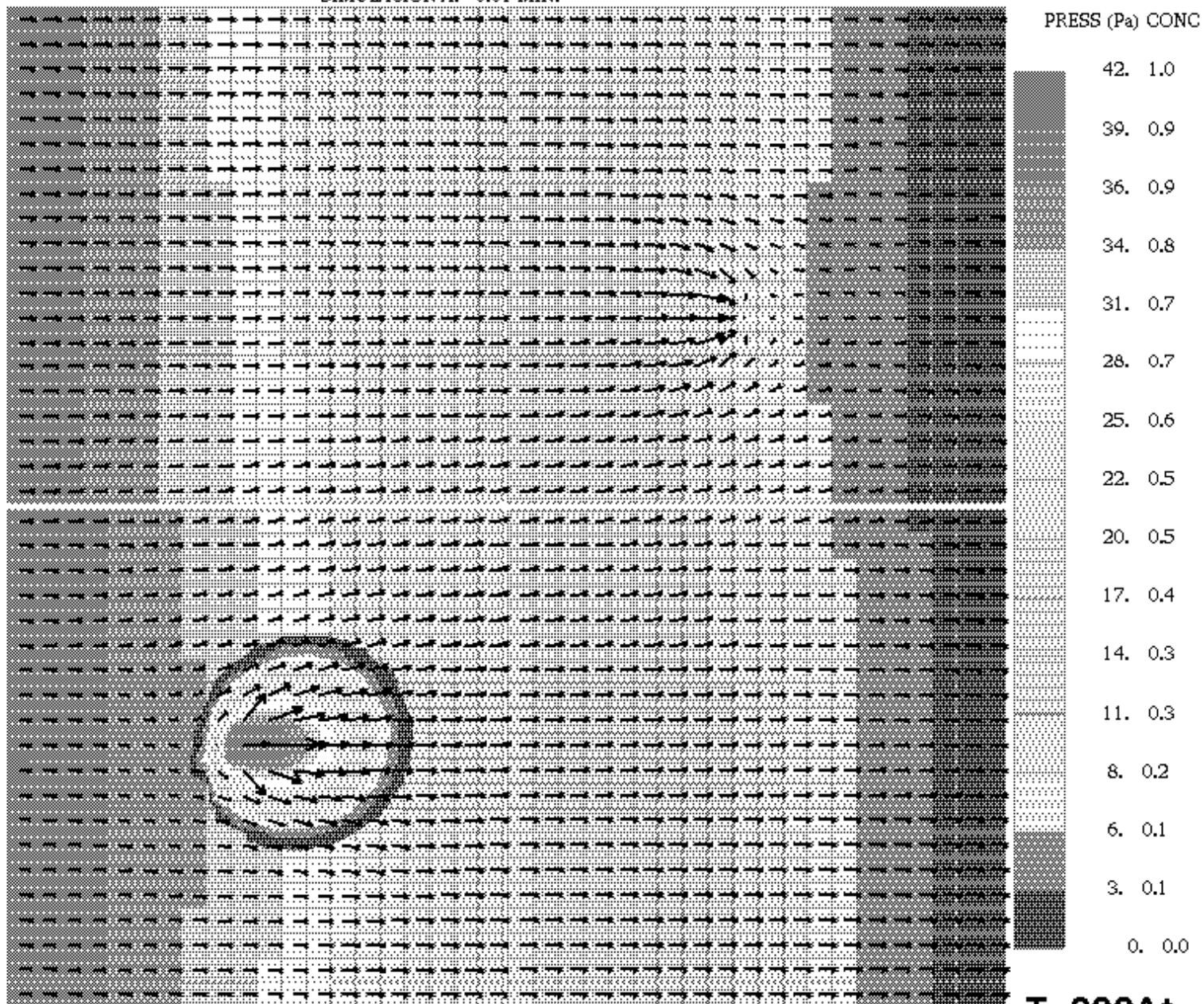
SIMULACION A: 0.01 MIN.



$T=250\Delta t$

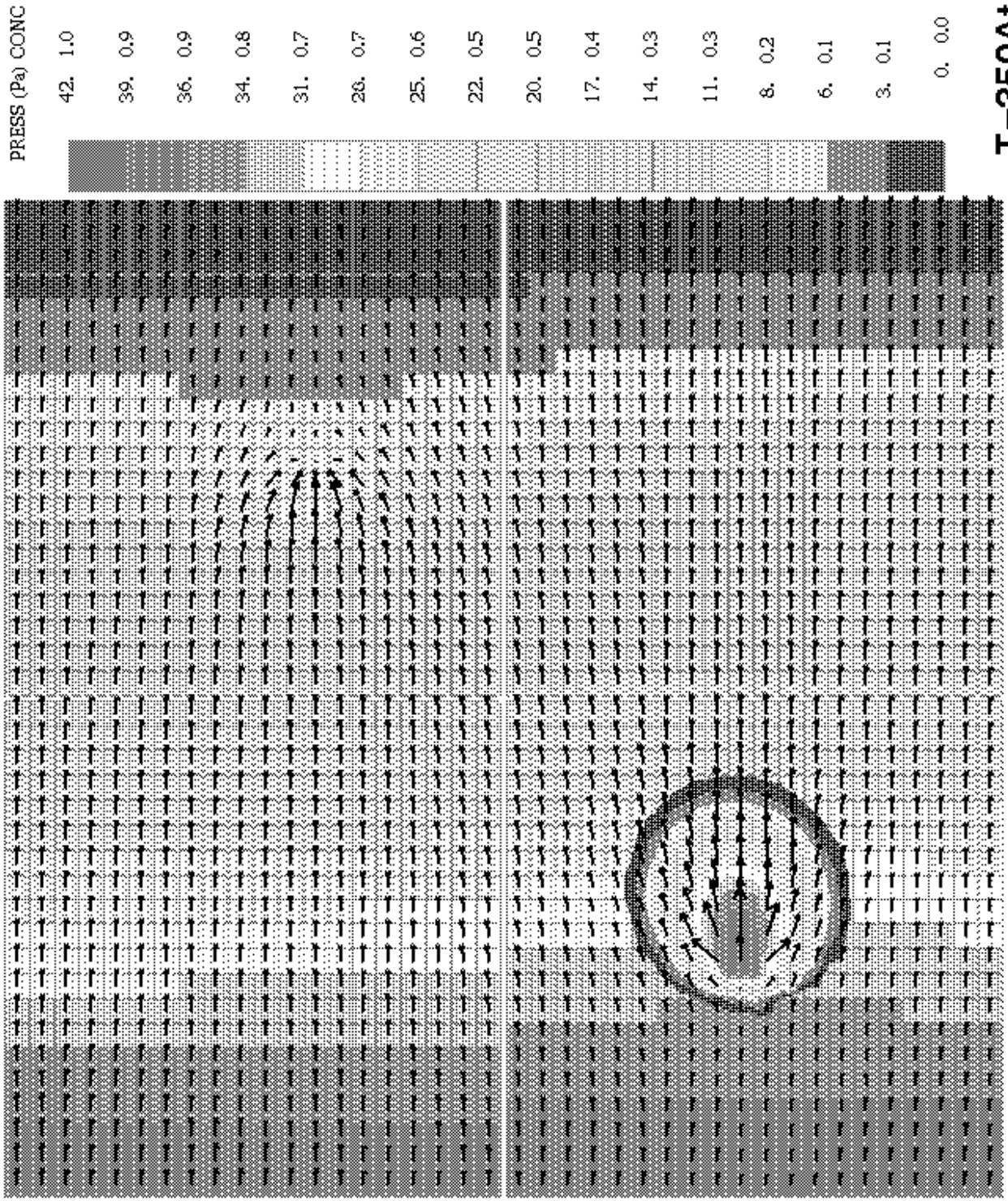


SIMULACION A: 0.01 MIN.



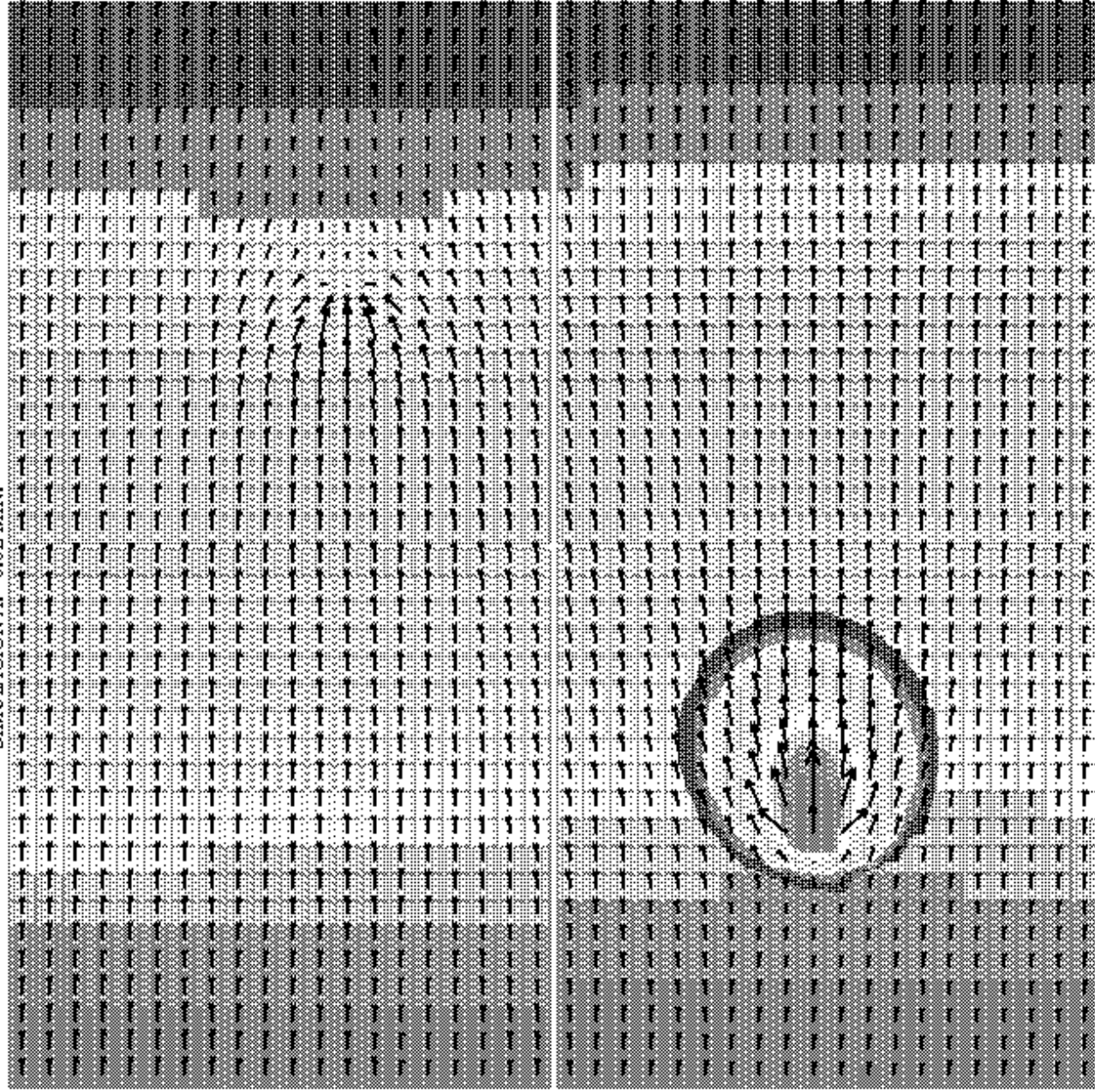
$T=300\Delta t$

SIMULACION A: 0.02 MIN.



$T=350\Delta t$

SIMULACION A: 0.02 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

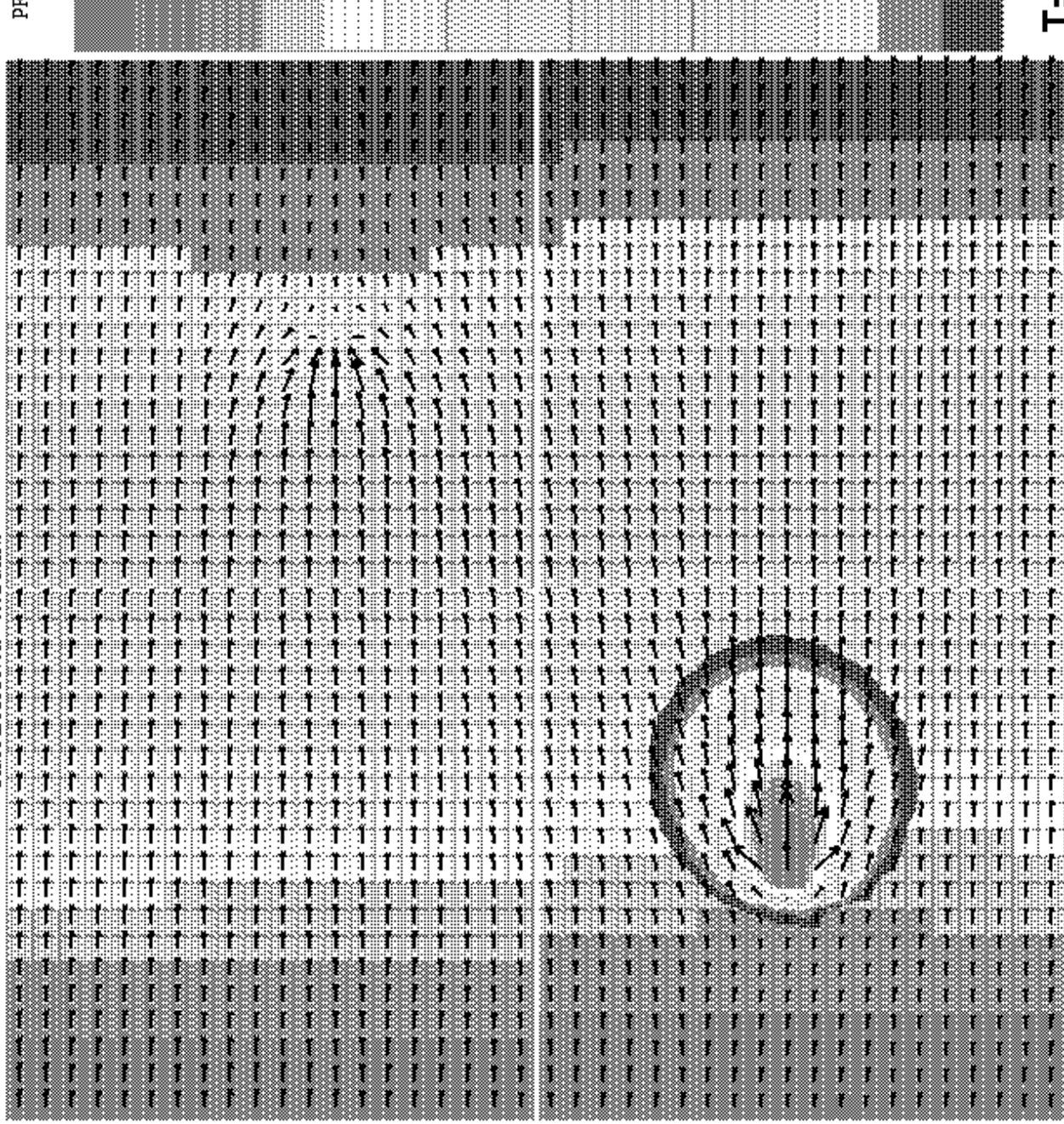
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

$T=400\Delta t$

SIMULACION A: 0.02 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

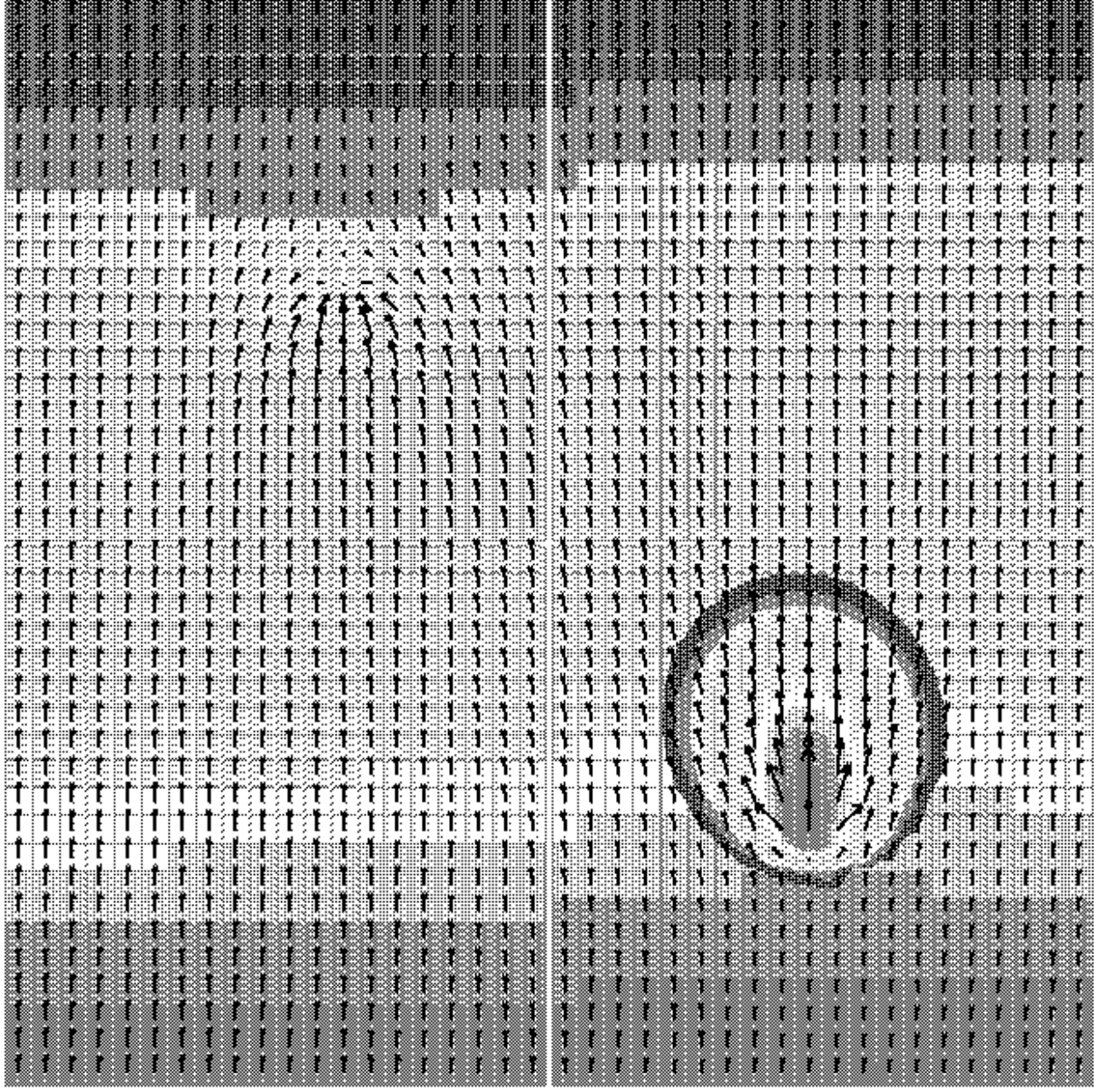
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

$T=450\Delta t$

SIMULACION A: 0.02 MIN.



PRESS (Pa) CONTC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

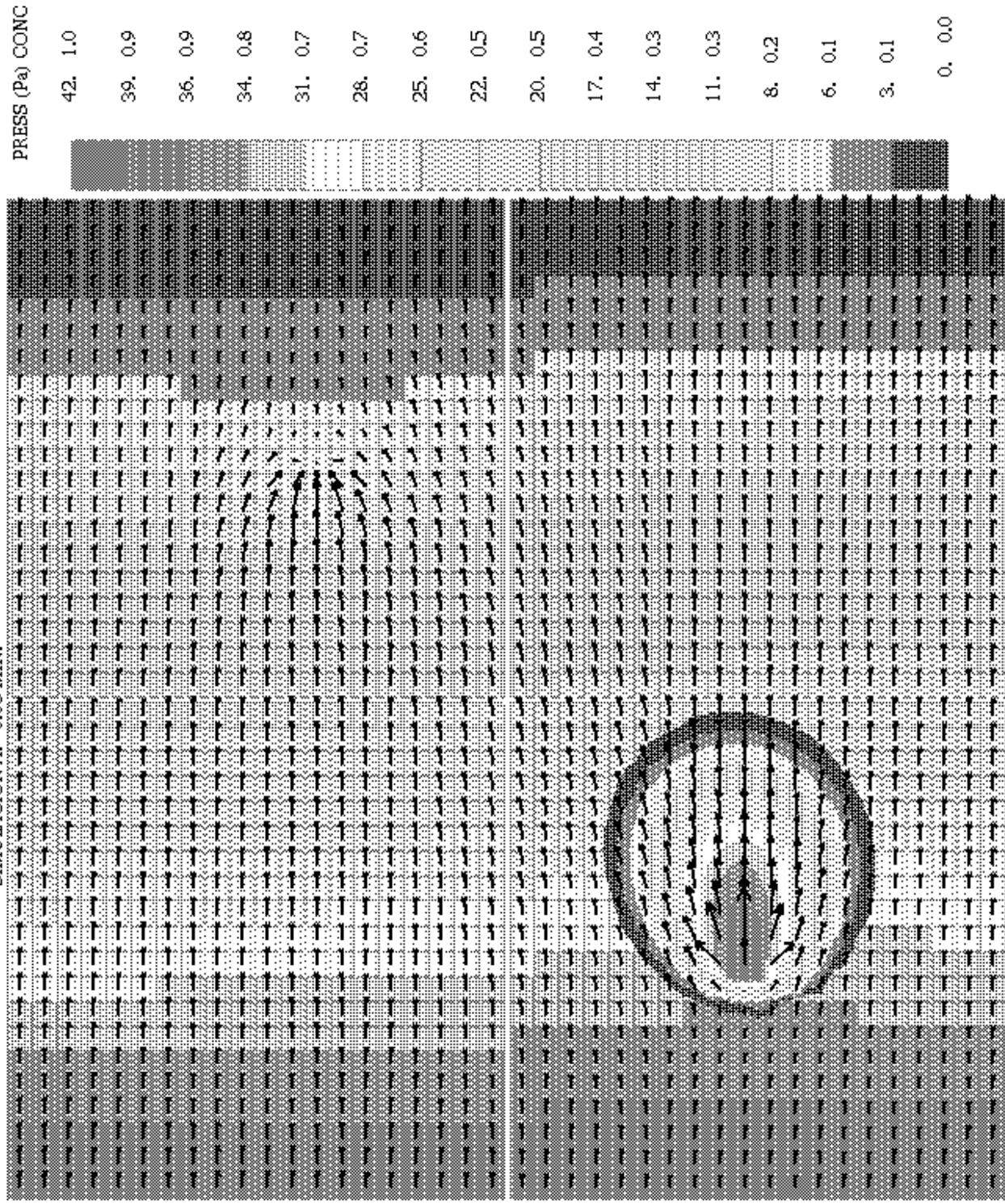
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

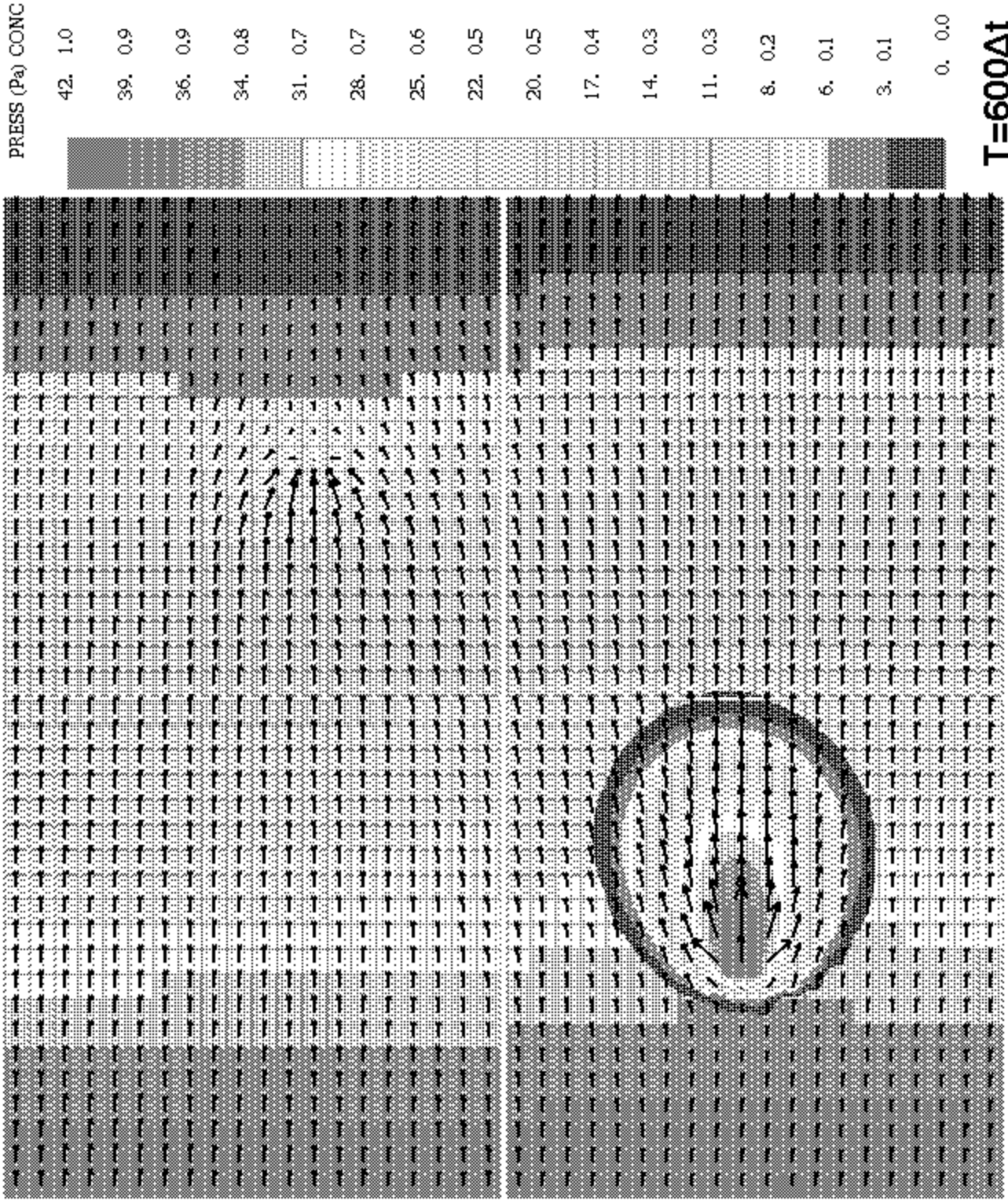
T=500Δt

SIMULACION A: 0.03 MIN.

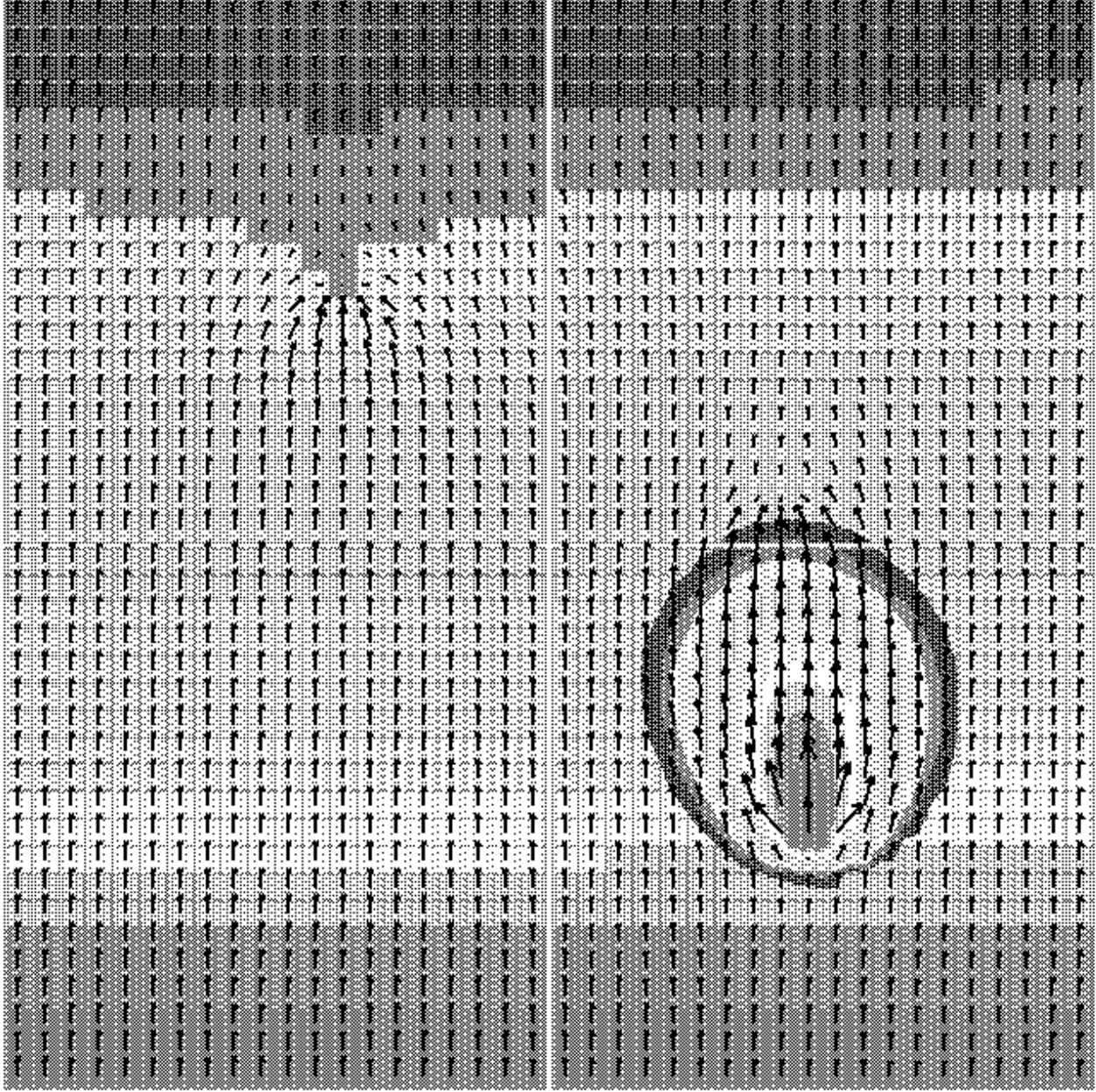


$T=550\Delta t$

SIMULACION A: 0.03 MIN.



SIMULACION A: 0.03 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

6. 0.1

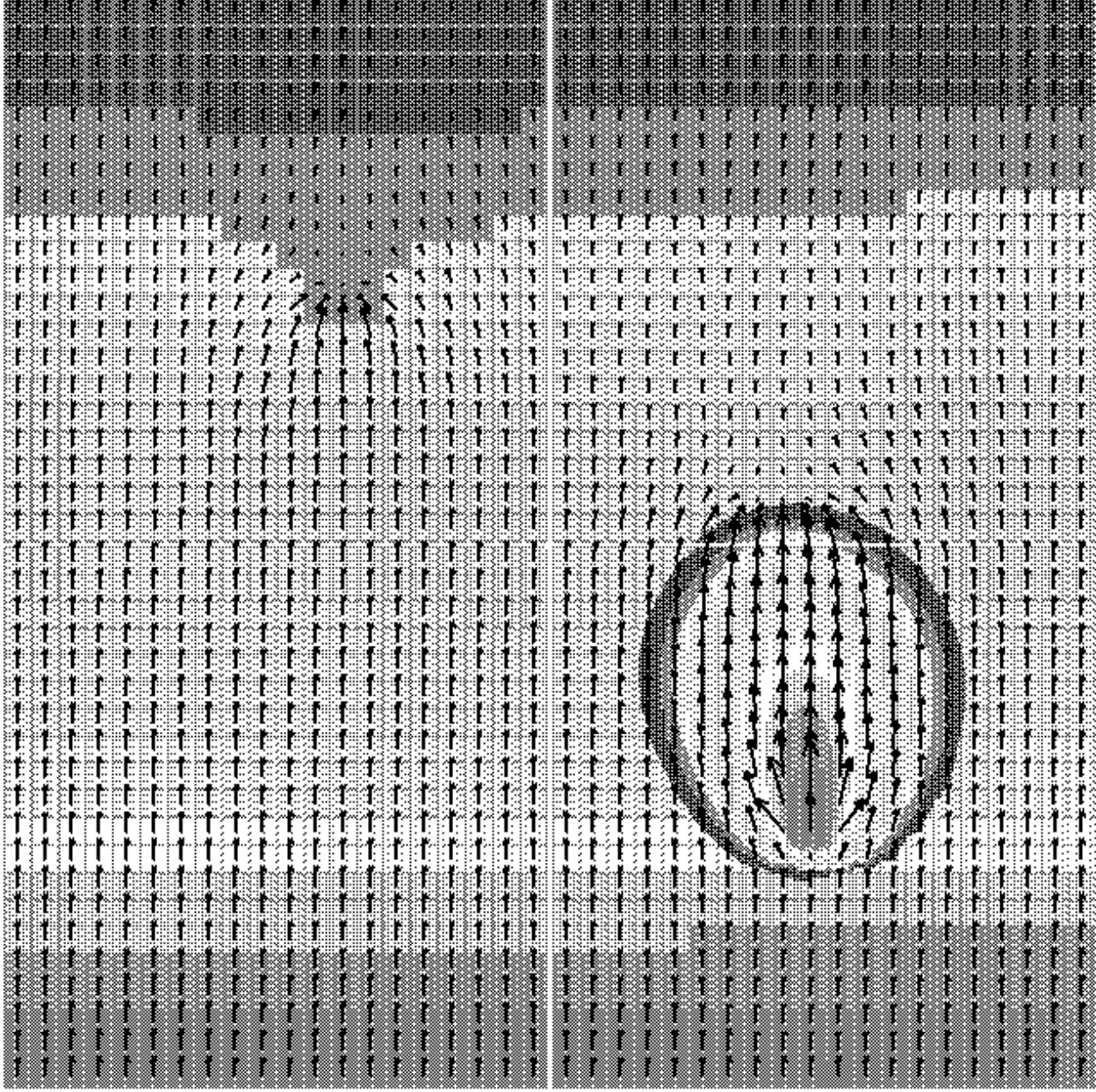
3. 0.1

0. 0.0

$T=650\Delta t$



SIMULACION A: 0.03 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

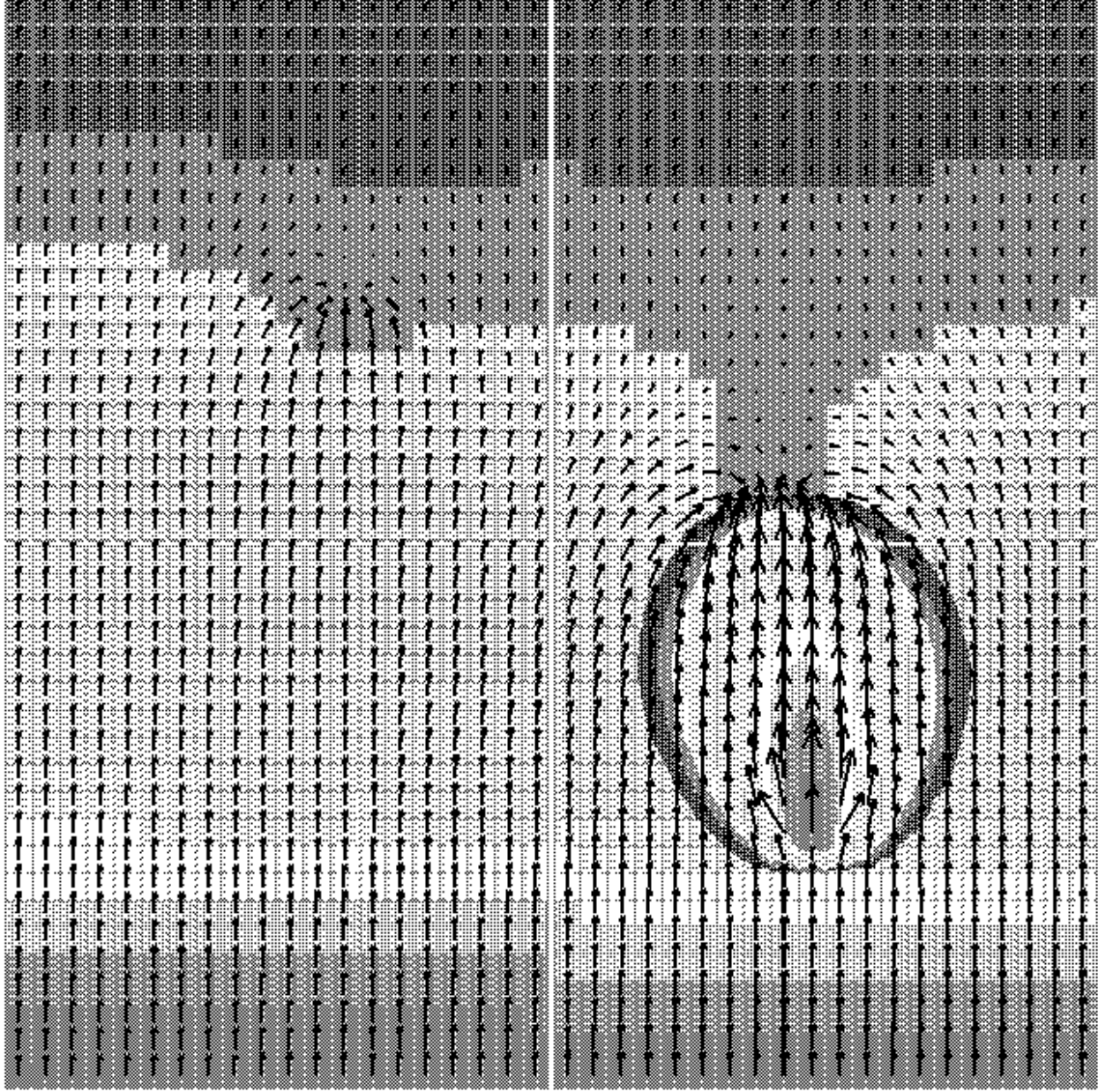
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

$T = 700\Delta t$

SIMULACION A: 0.03 MIN.



PRESS (Pa) CONC

42. 1.0

39. 0.9

36. 0.9

34. 0.8

31. 0.7

28. 0.7

25. 0.6

22. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

11. 0.3

8. 0.2

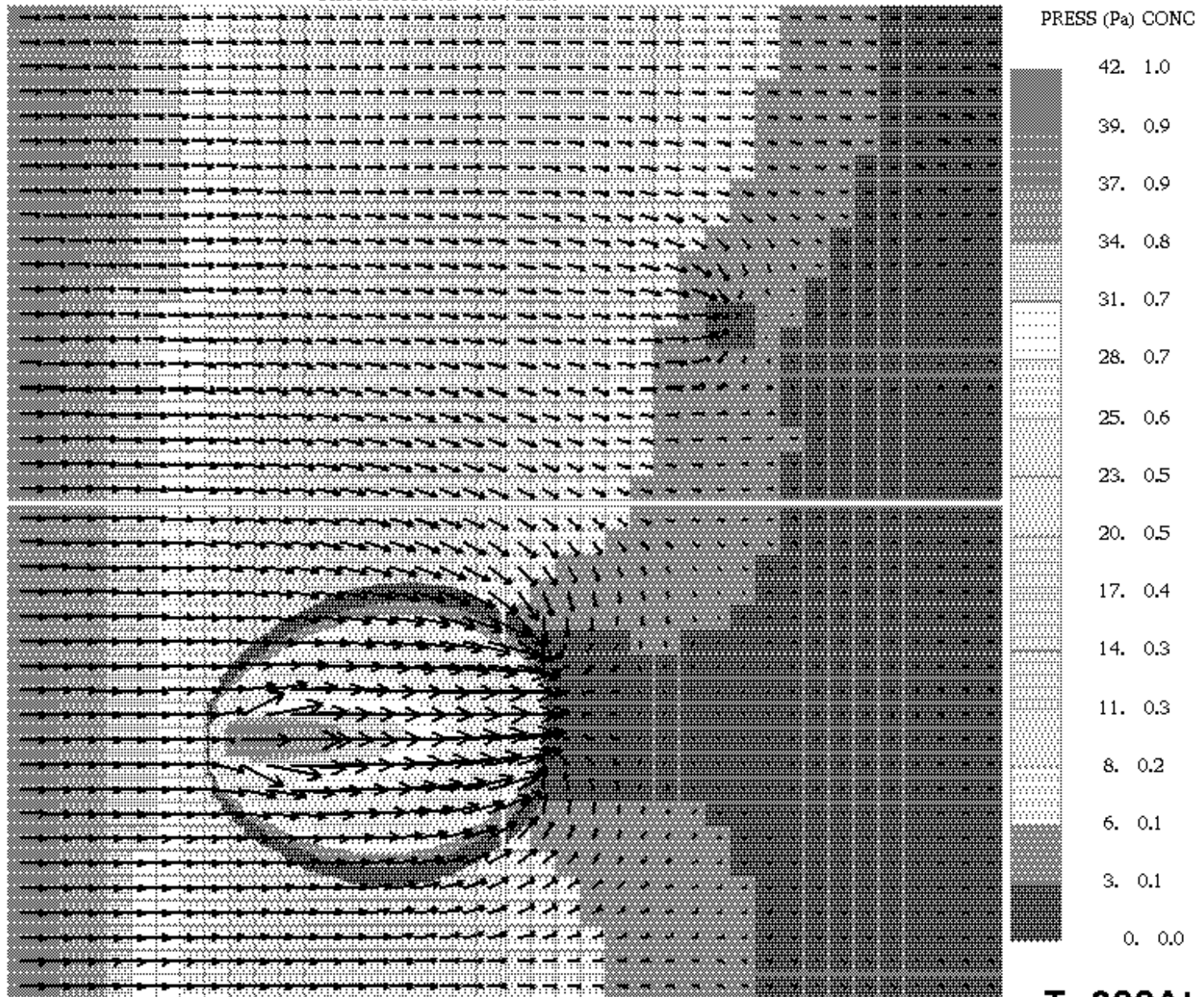
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

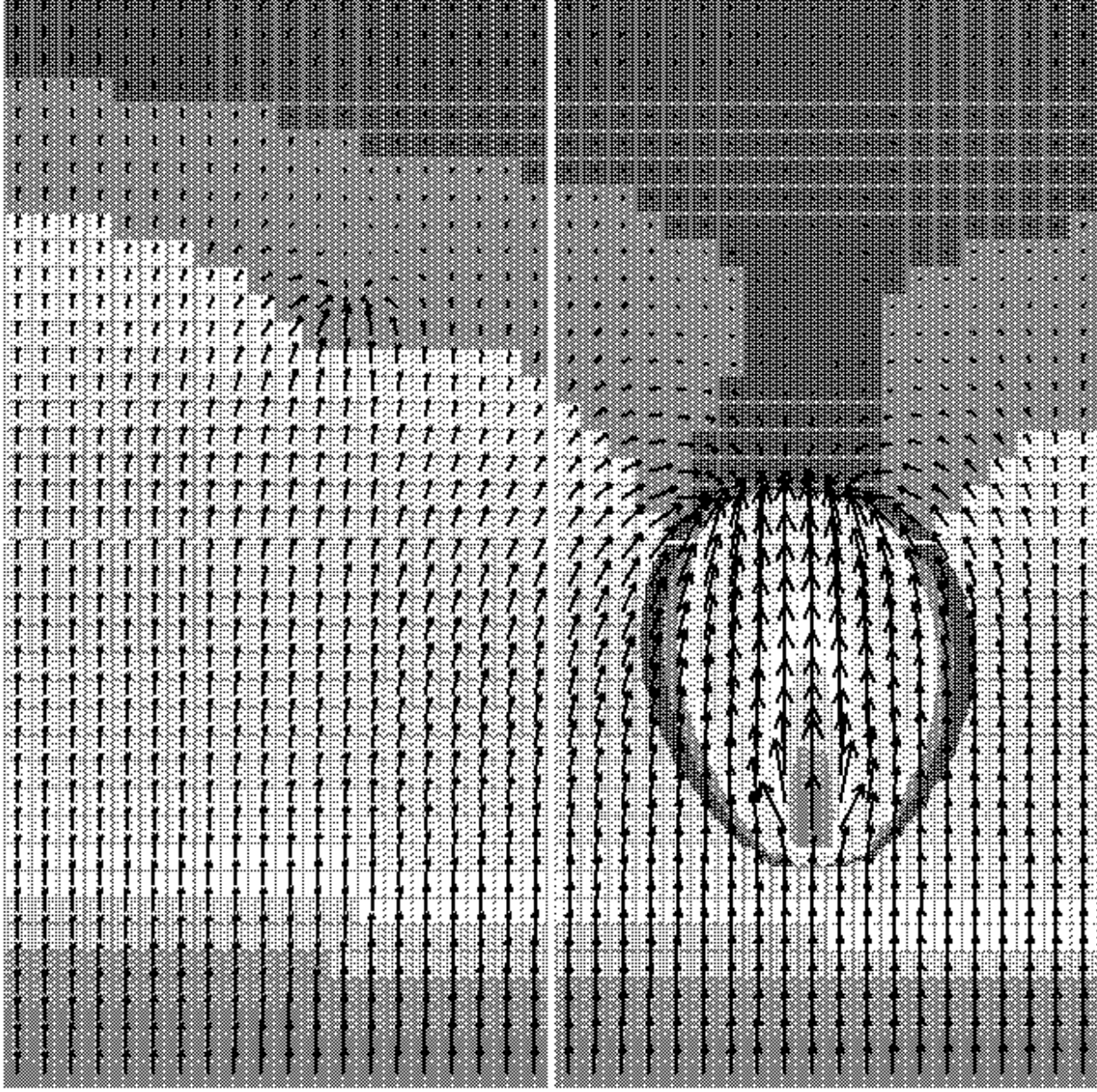
$T=750\Delta t$

SIMULACION A: 0.04 MIN.



$T=800\Delta t$

SIMULACION A: 0.04 MIN.



PRESS (Pa) CONC

43. 1.0

40. 0.9

38. 0.9

35. 0.8

32. 0.7

29. 0.7

26. 0.6

23. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

12. 0.3

9. 0.2

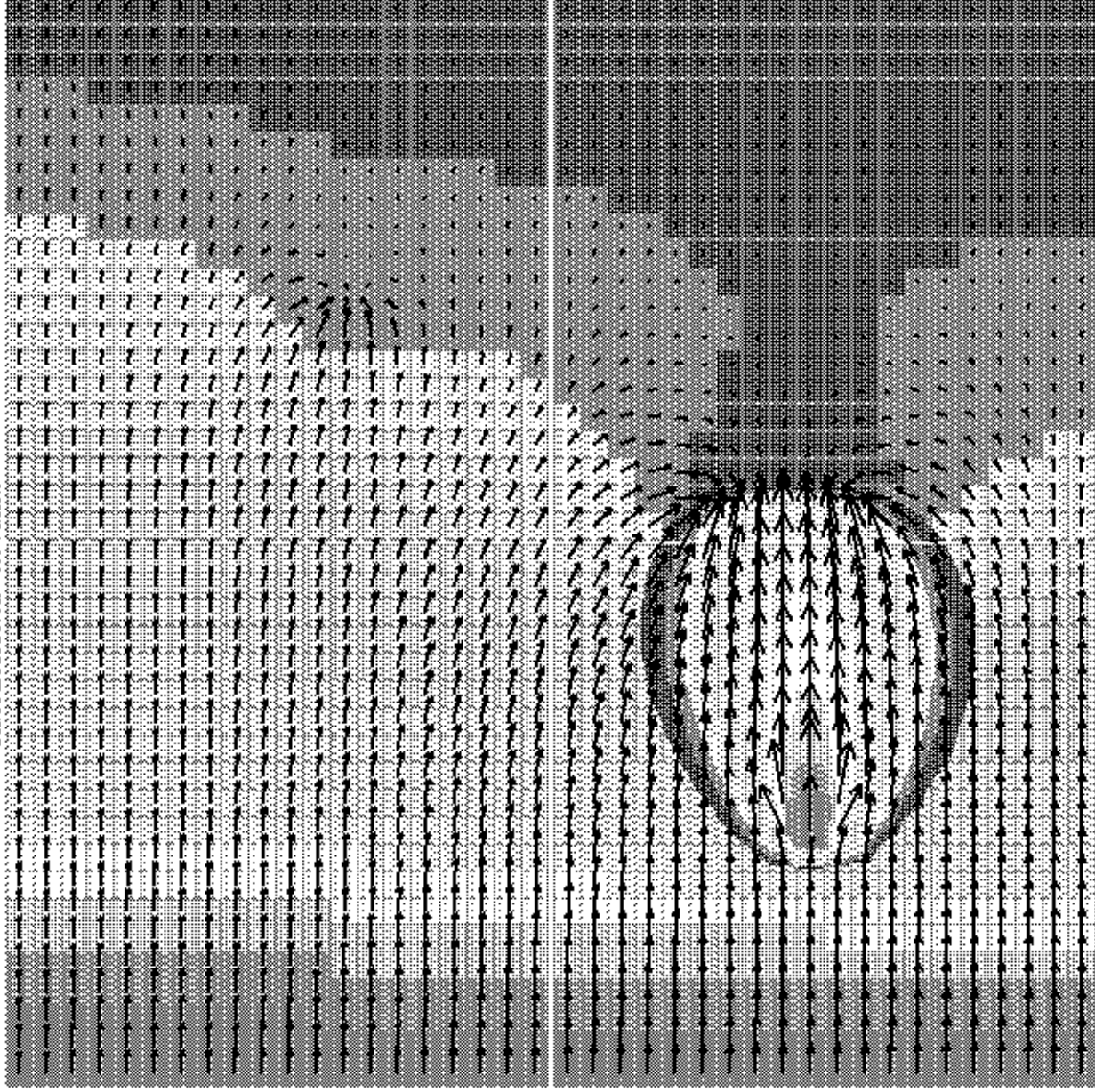
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

$T=850\Delta t$

SIMULACION A: 0.04 MIN.



PRESS (Pa) CONC

43. 1.0

40. 0.9

37. 0.9

35. 0.8

32. 0.7

29. 0.7

26. 0.6

23. 0.5

20. 0.5

17. 0.4

14. 0.3

12. 0.3

9. 0.2

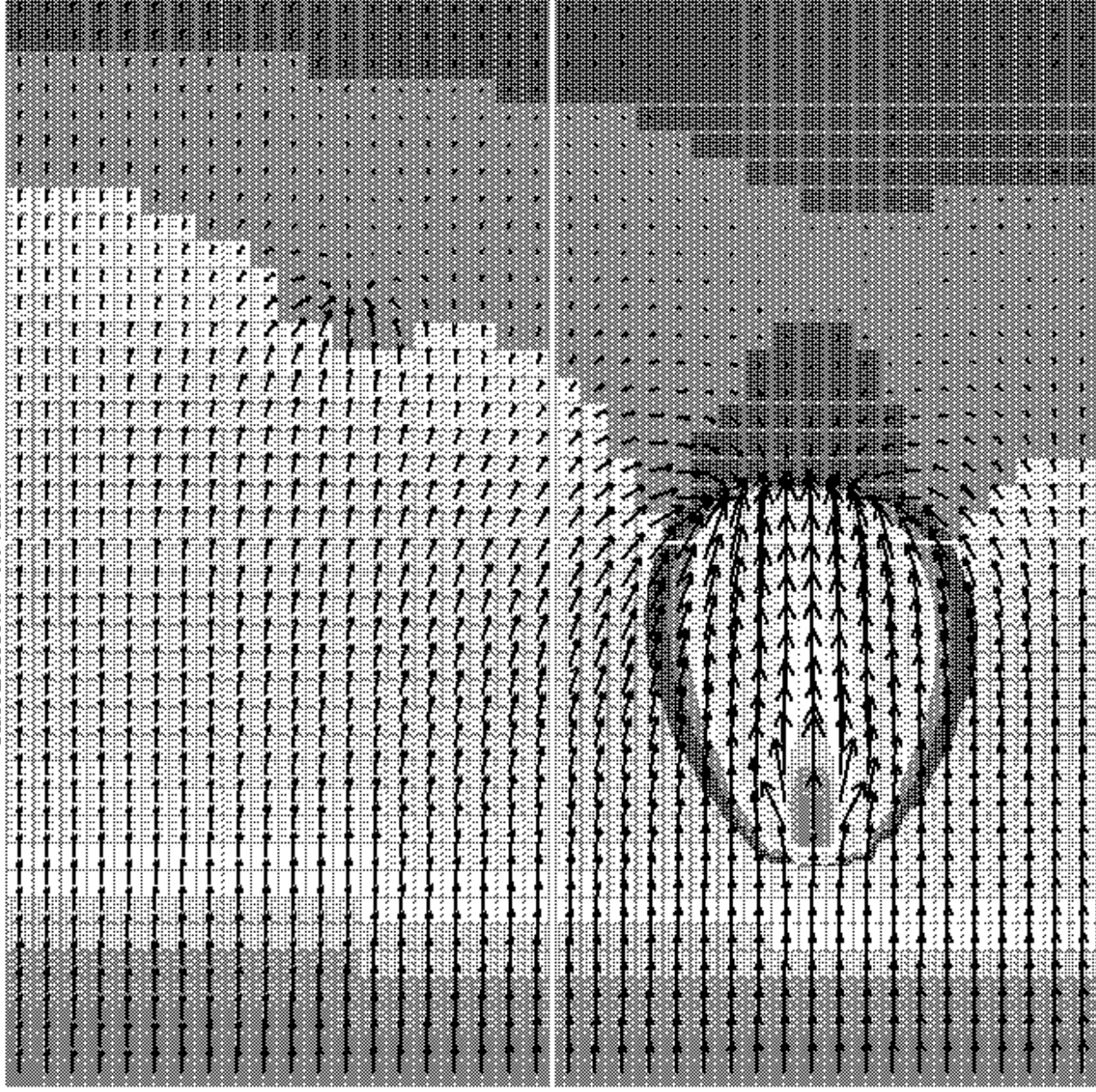
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

**T=900Δt**

SIMULACION A: 0,04 MIN.



PRESS (Pa) CONC

44. 1.0

41. 0.9

38. 0.9

35. 0.8

33. 0.7

30. 0.7

27. 0.6

24. 0.5

21. 0.5

18. 0.4

15. 0.3

12. 0.3

9. 0.2

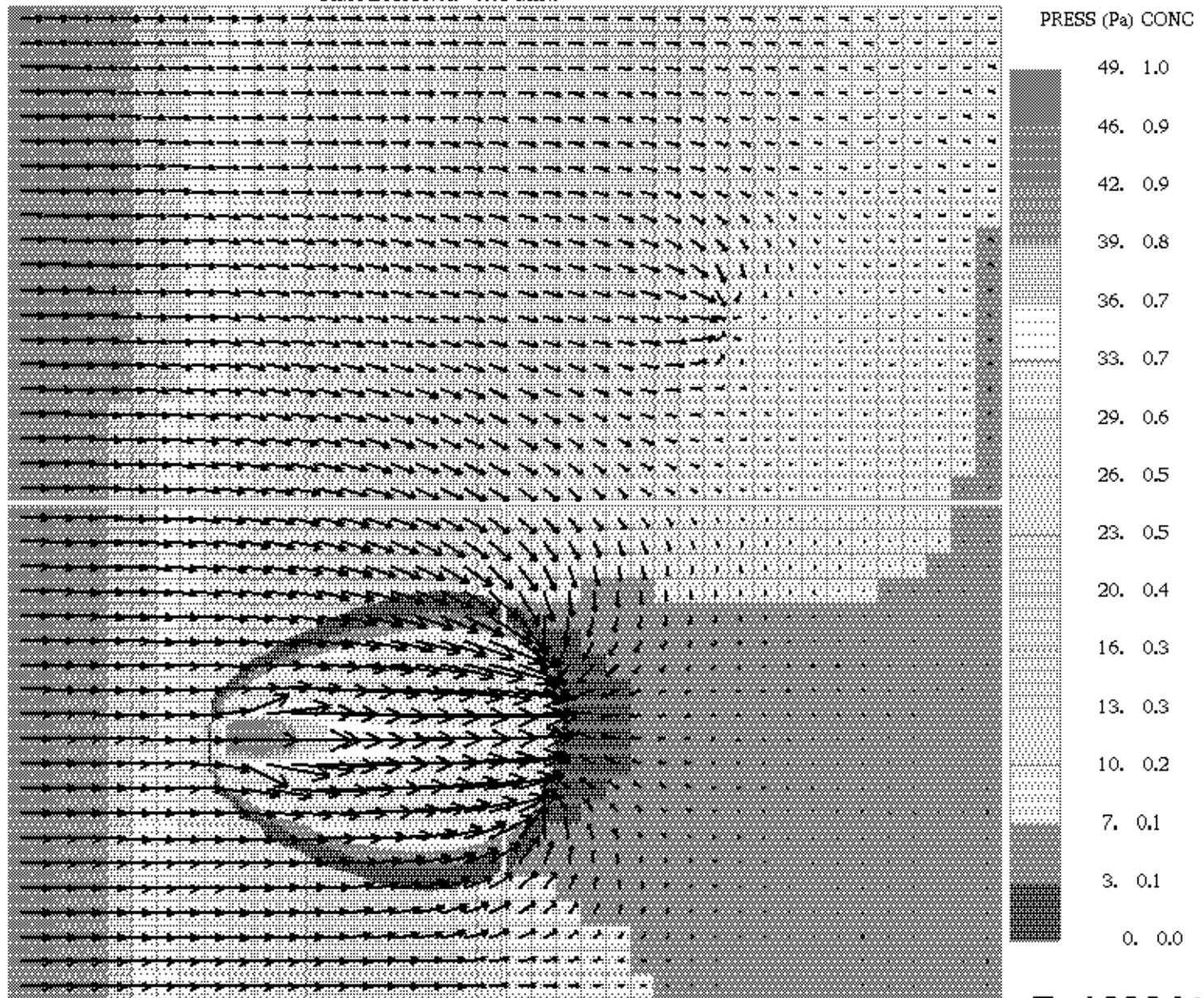
6. 0.1

3. 0.1

0. 0.0

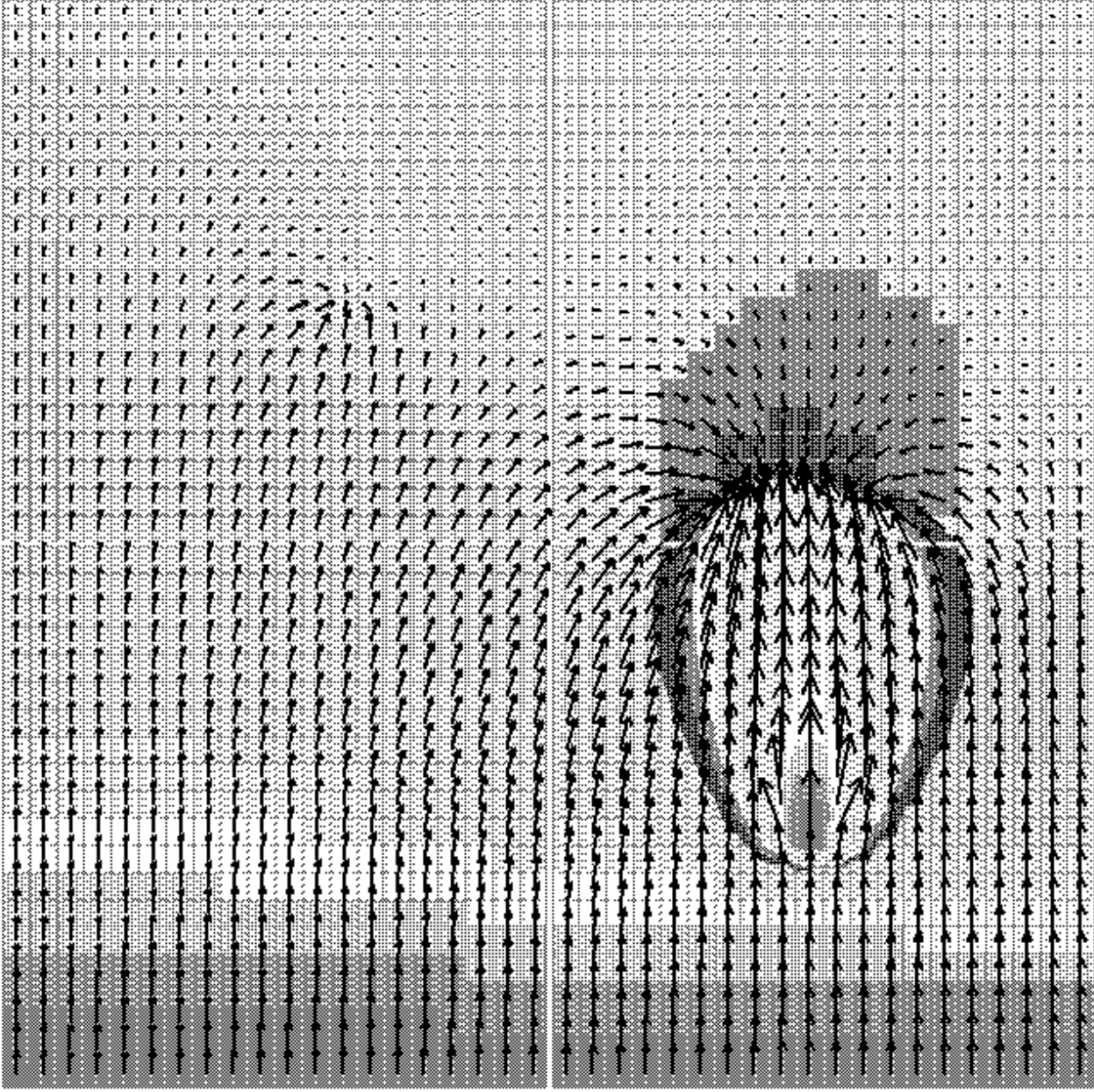
$T=950\Delta t$

SIMULACION A: 0.05 MIN.

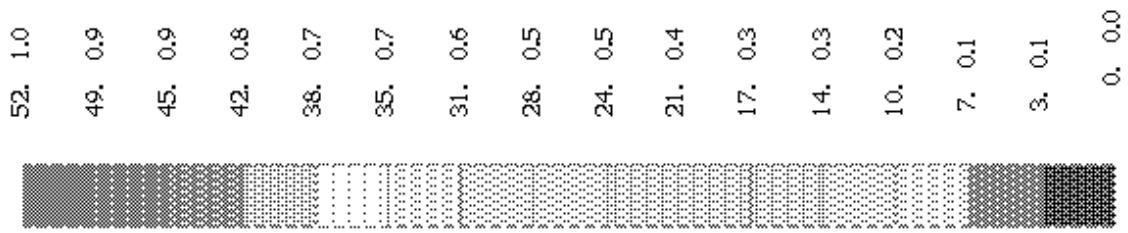


T=1000Δt

SIMULACION A: 0.05 MIN.



PRESS (Pa) CONC

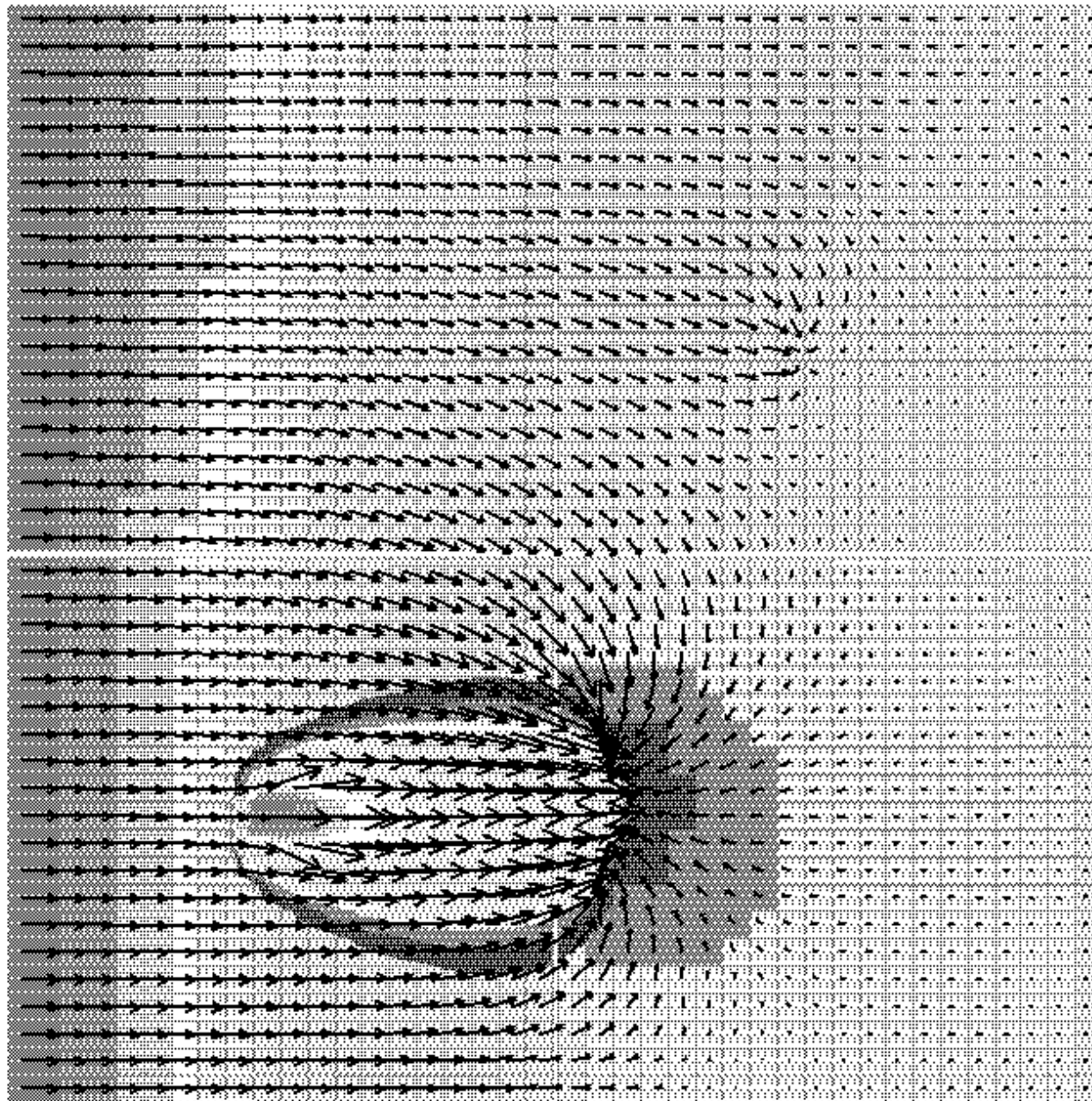


- 52. 1.0
- 49. 0.9
- 45. 0.9
- 42. 0.8
- 38. 0.7
- 35. 0.7
- 31. 0.6
- 28. 0.5
- 24. 0.5
- 21. 0.4
- 17. 0.3
- 14. 0.3
- 10. 0.2
- 7. 0.1
- 3. 0.1
- 0. 0.0

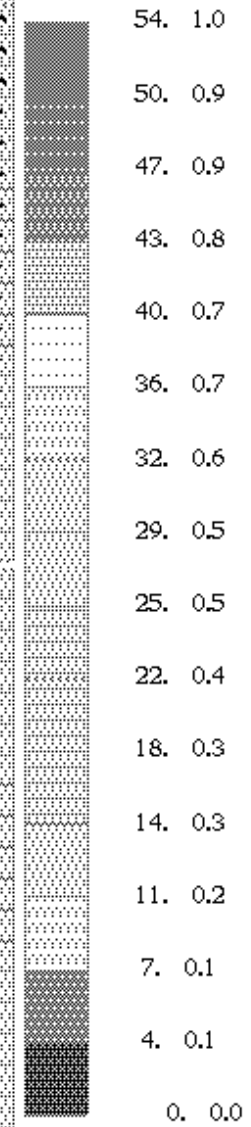
$T=1100\Delta t$



SIMULACION A: 0.05 MIN.

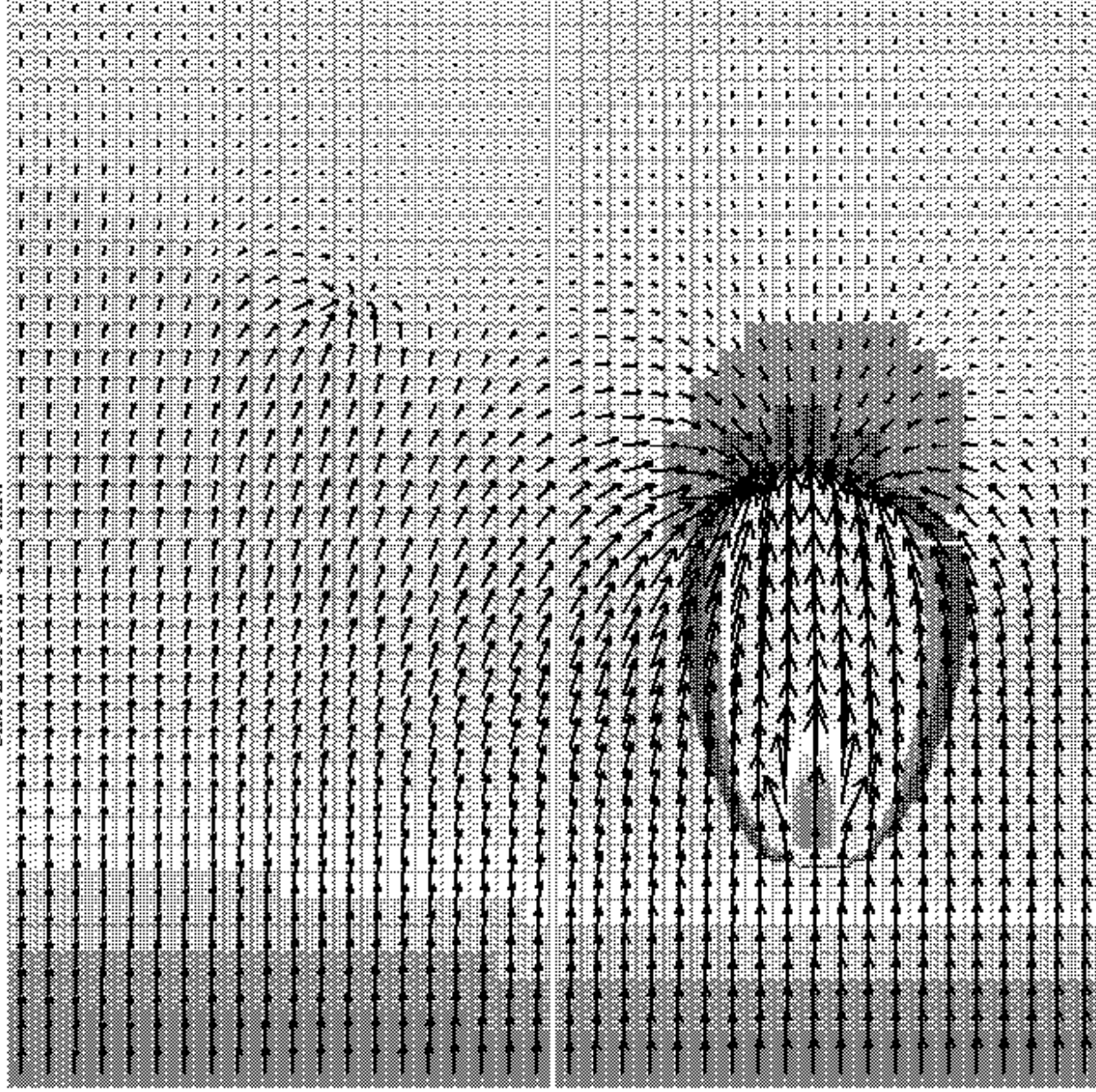


PRESS (Pa) CONC



$T=1200\Delta t$

SIMULACION A: 0.06 MIN.



PRESS (Pa) CONC

54. 1.0

51. 0.9

47. 0.9

43. 0.8

40. 0.7

36. 0.7

32. 0.6

29. 0.5

25. 0.5

22. 0.4

18. 0.3

14. 0.3

11. 0.2

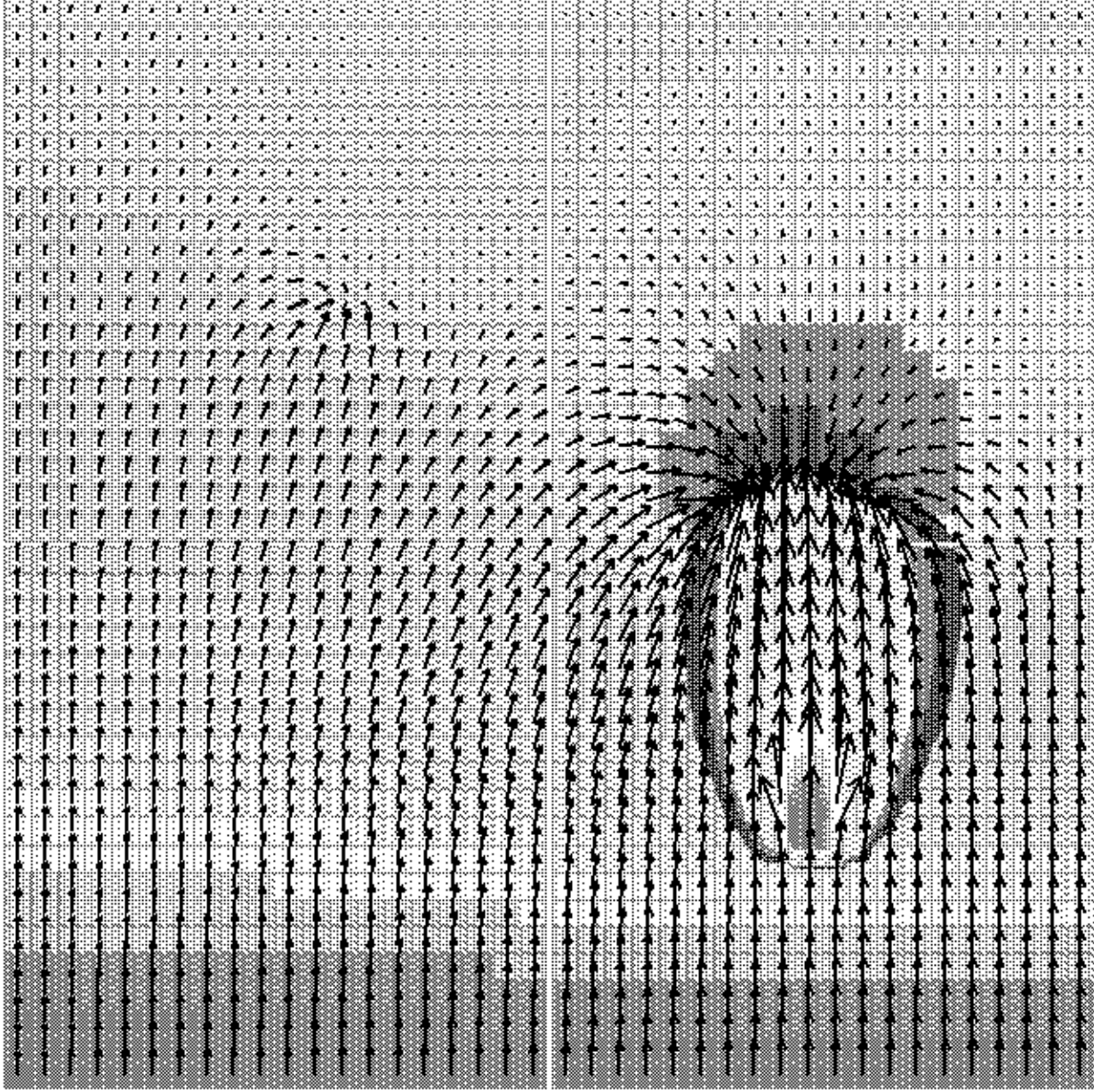
7. 0.1

4. 0.1

0. 0.0

$T=1300\Delta t$

SIMULACION A: 0.06 MIN.



PRESS (Pa) CONC

54. 1.0

51. 0.9

47. 0.9

43. 0.8

40. 0.7

36. 0.7

33. 0.6

29. 0.5

25. 0.5

22. 0.4

18. 0.3

14. 0.3

11. 0.2

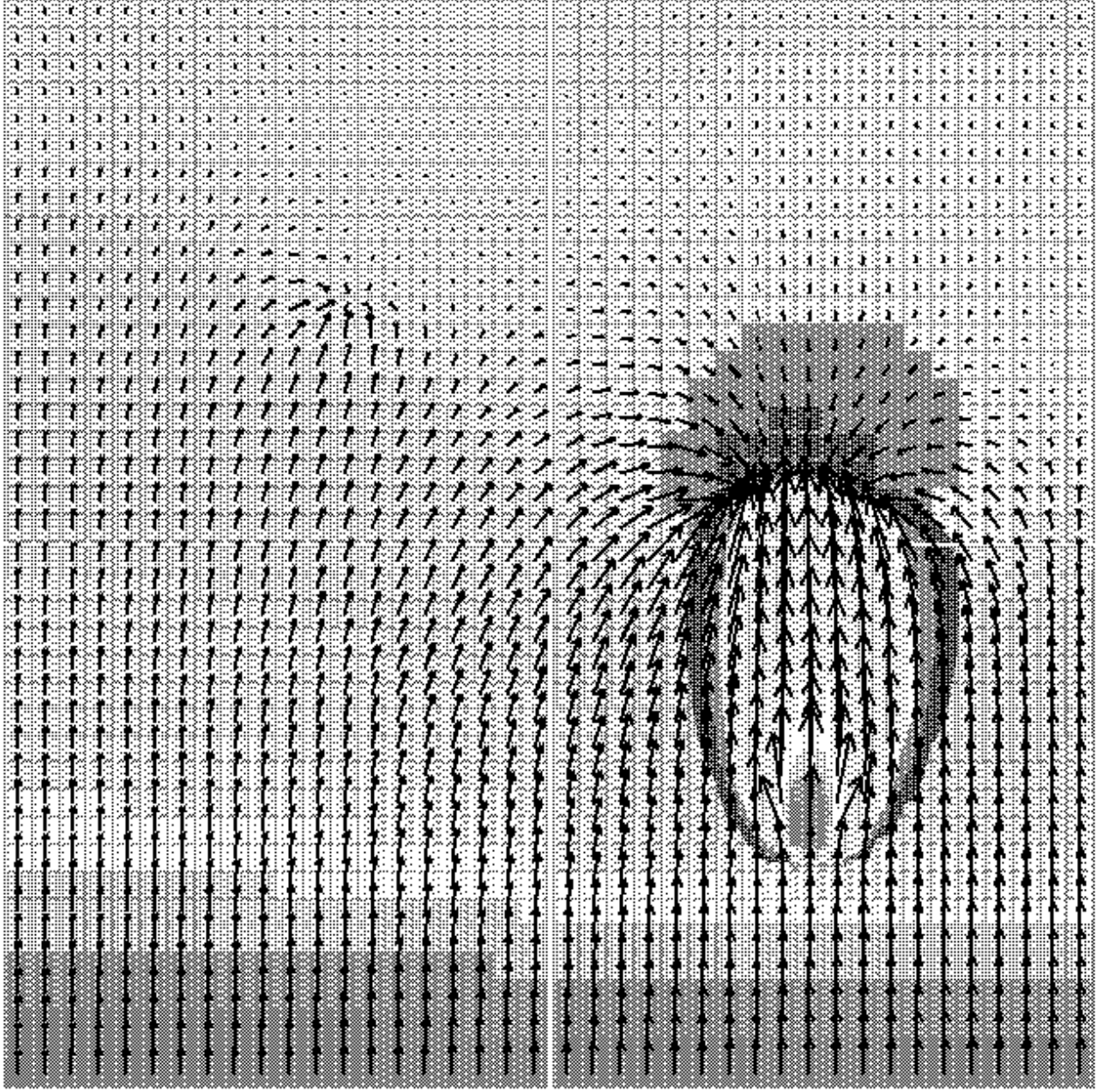
7. 0.1

4. 0.1

0. 0.0

$T=1400\Delta t$

SIMULACION A: 0.06 MIN.



PRESS (Pa) CONC

54. 1.0

51. 0.9

47. 0.9

43. 0.8

40. 0.7

36. 0.7

33. 0.6

29. 0.5

25. 0.5

22. 0.4

18. 0.3

14. 0.3

11. 0.2

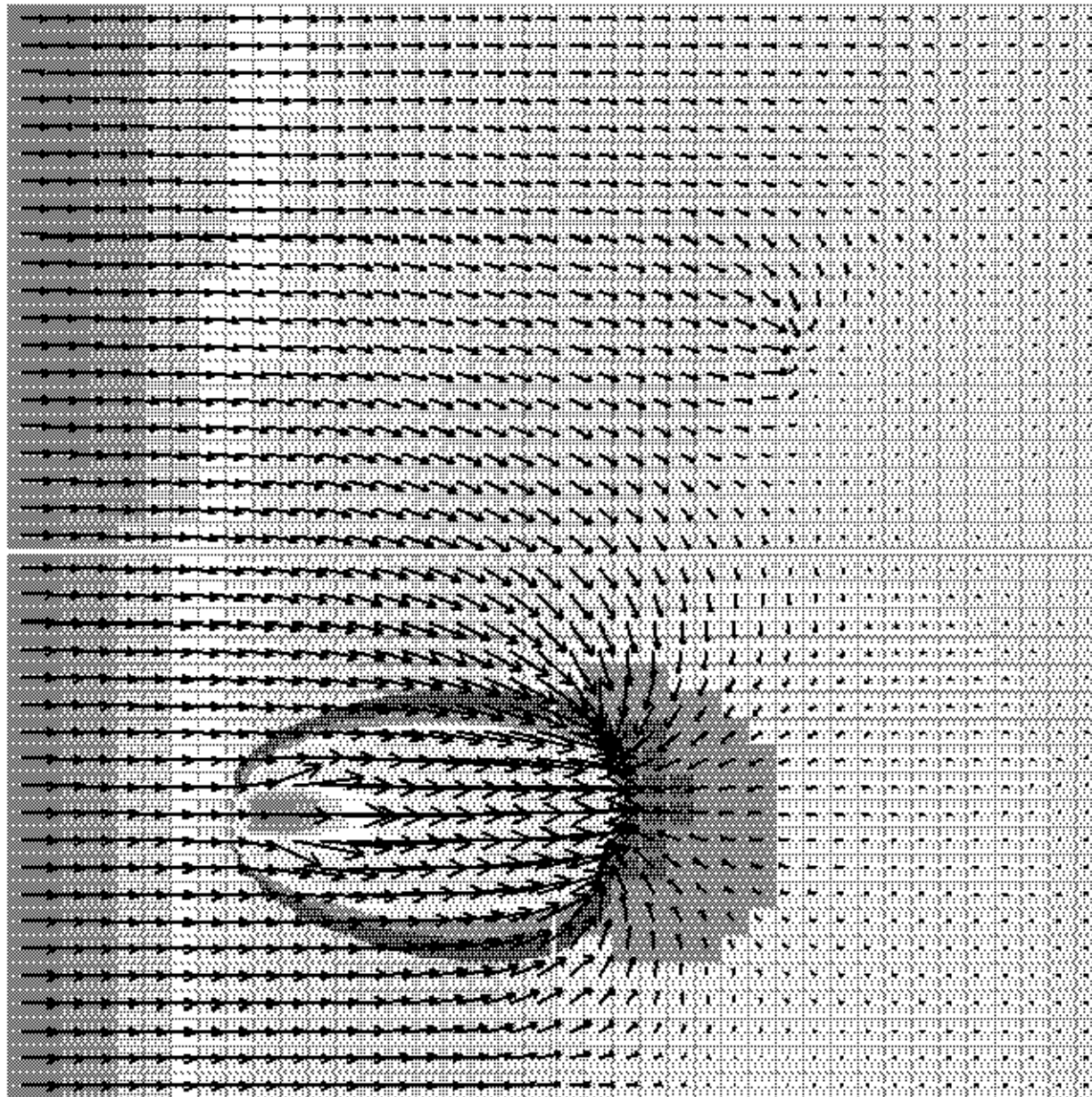
7. 0.1

4. 0.1

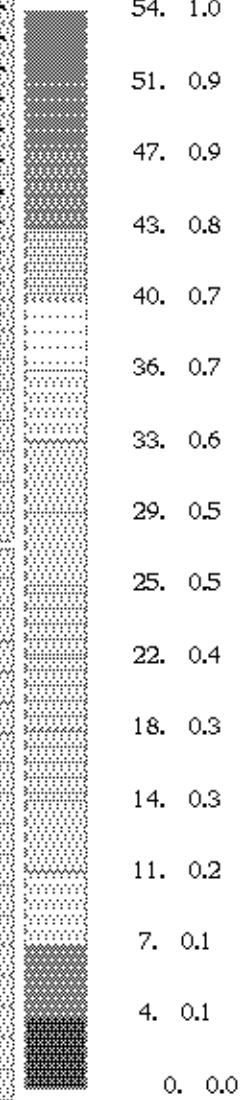
0. 0.0

**T=1500Δt**

SIMULACION A: 0.06 MIN.

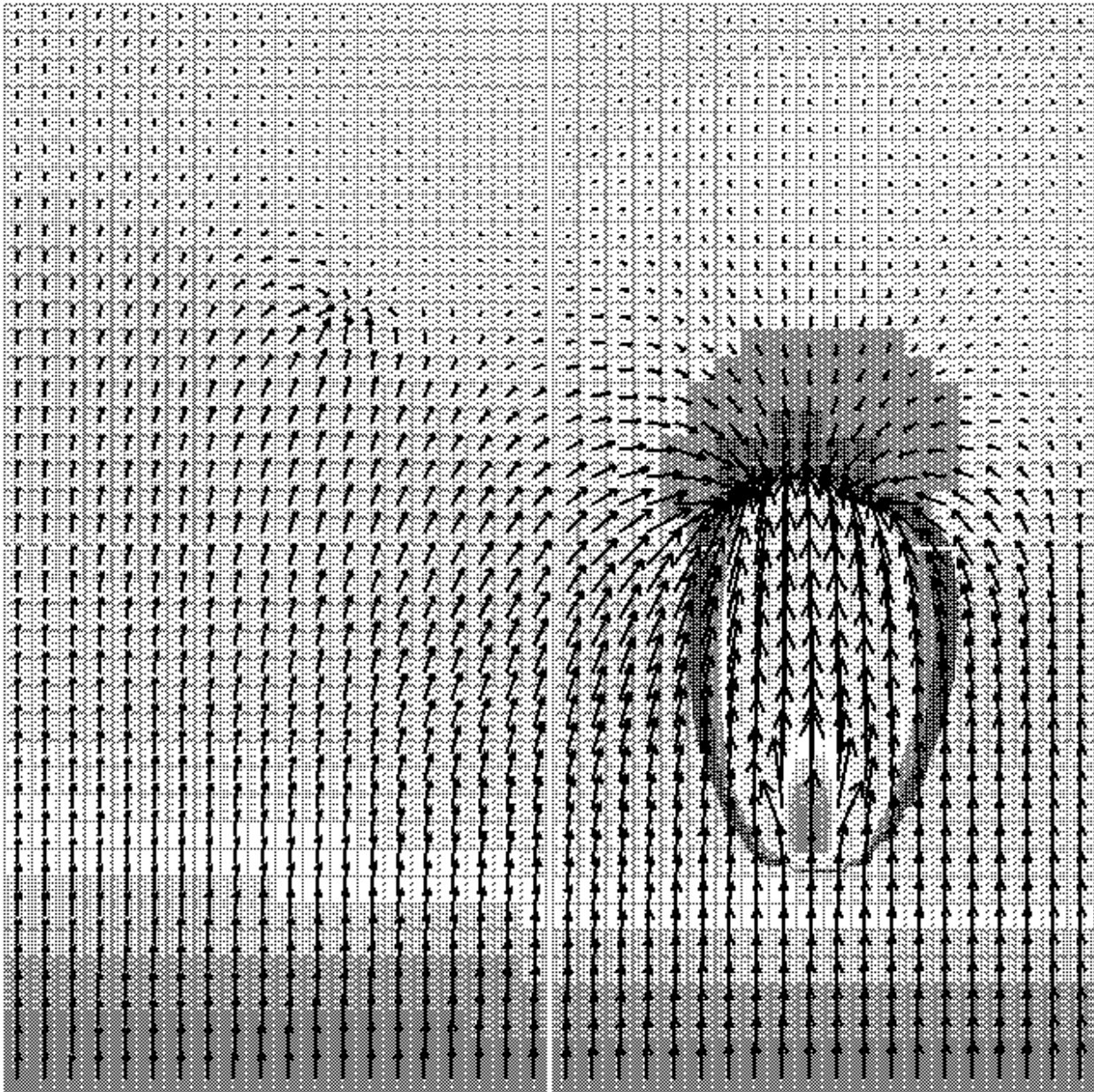


PRESS (Pa) CONC

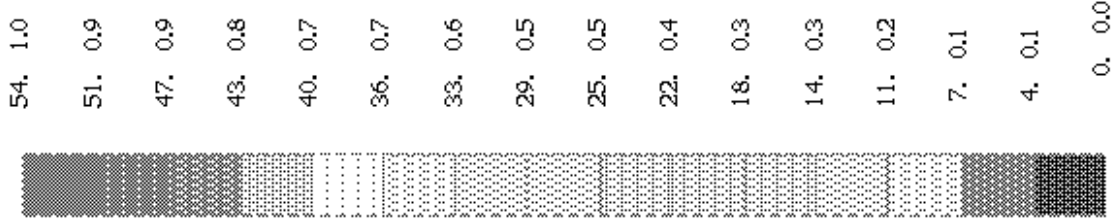


$T=1600\Delta t$

SIMULACION A: 0.07 MIN.

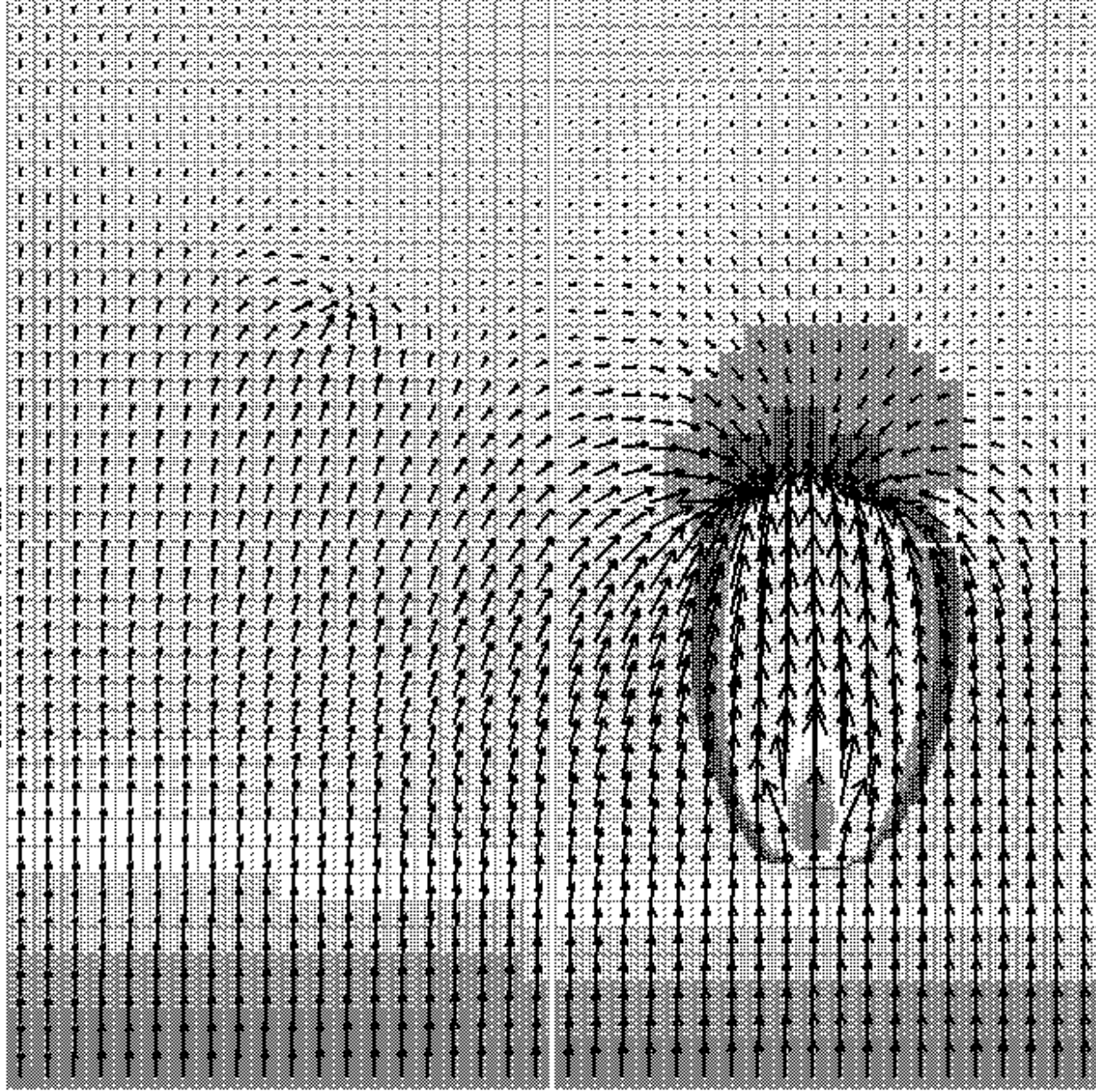


PRESS (Pa) CONC



$T=1700\Delta t$

SIMULACION A: 0.07 MIN.



PRESS (Pa) CONTC

54. 1.0

51. 0.9

47. 0.9

43. 0.8

40. 0.7

36. 0.7

33. 0.6

29. 0.5

25. 0.5

22. 0.4

18. 0.3

14. 0.3

11. 0.2

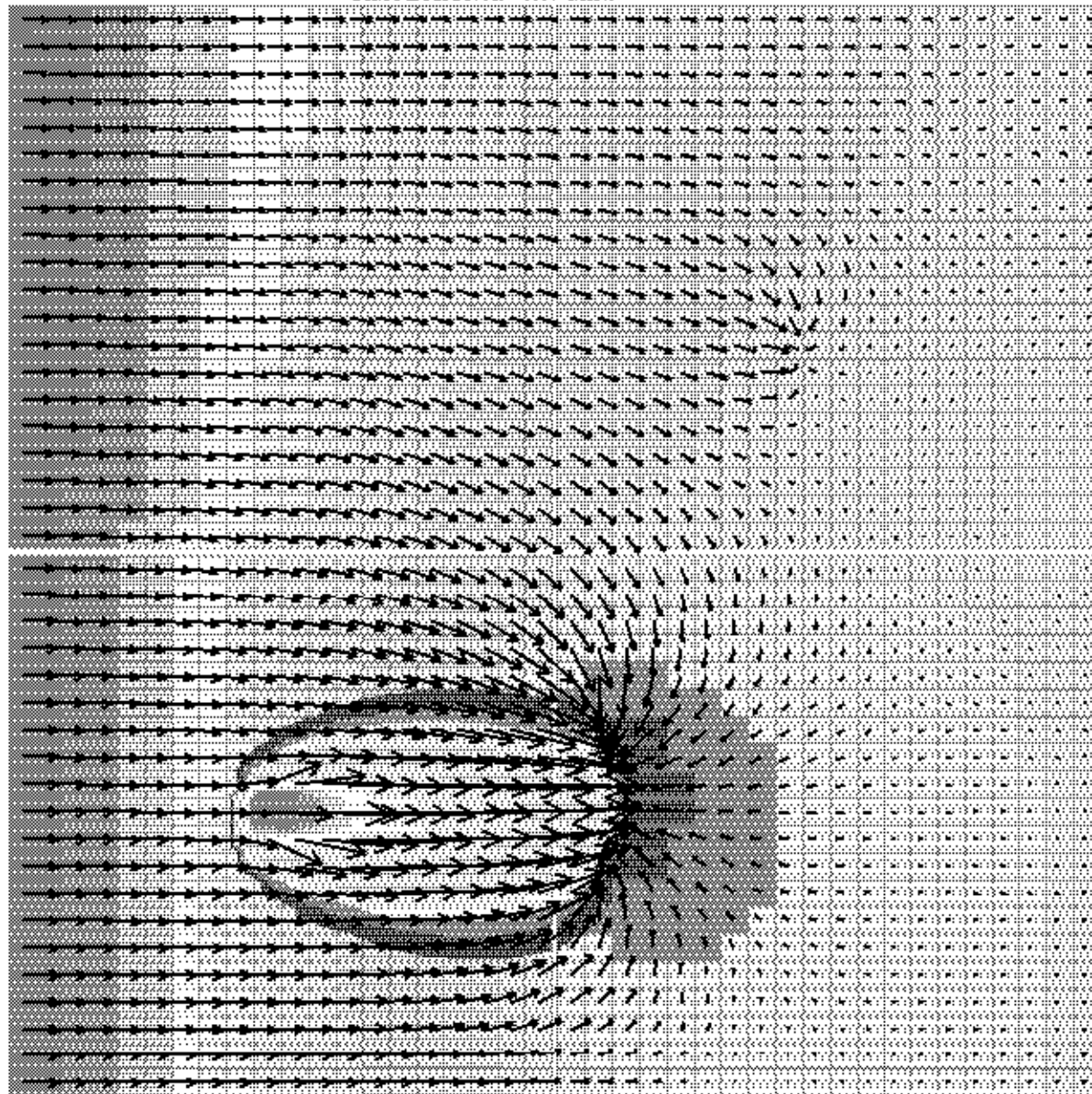
7. 0.1

4. 0.1

0. 0.0

$T=1800\Delta t$

SIMULACION A: 0.07 MIN.



PRESS (Pa) CONC

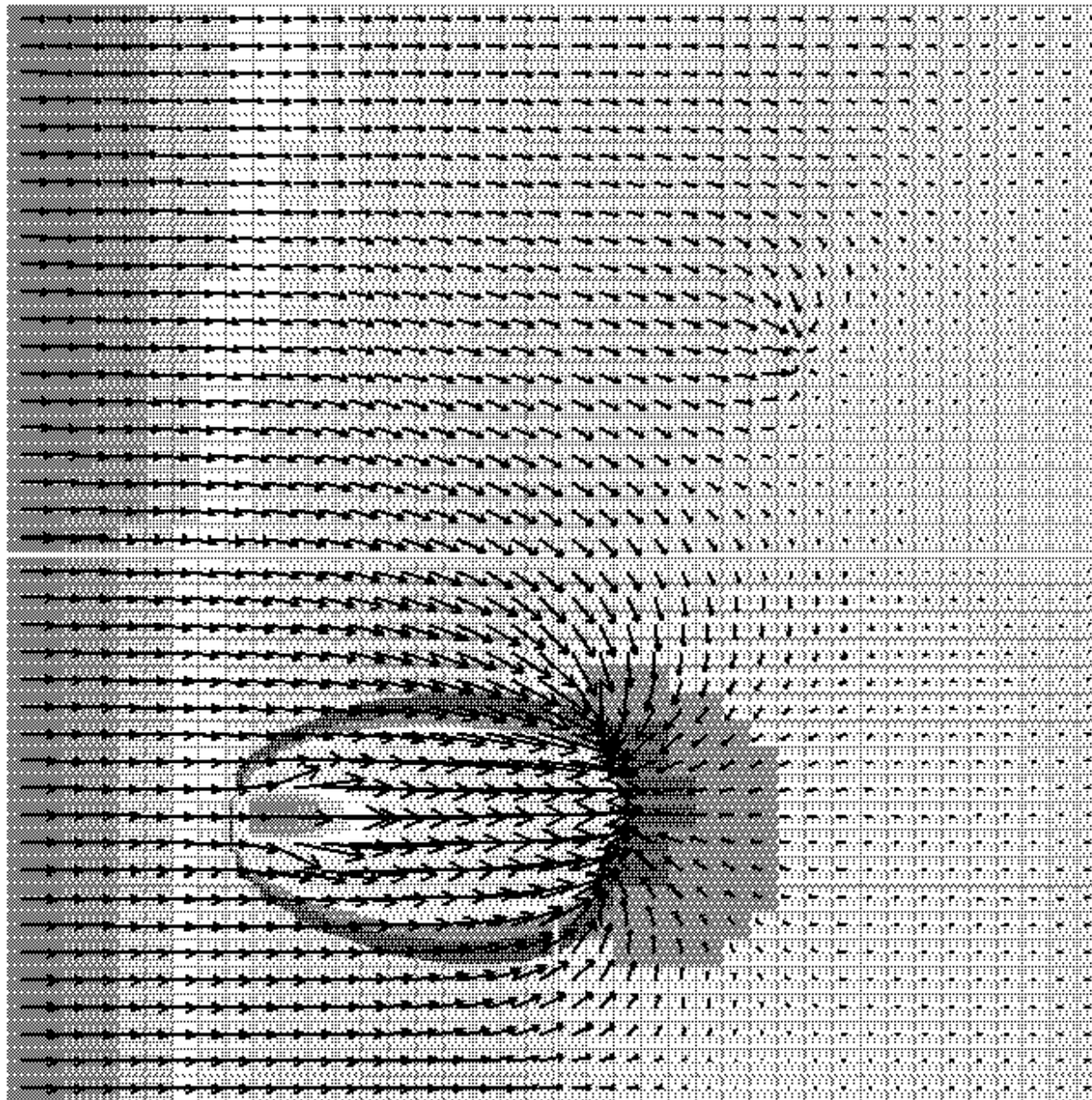


54.	1.0
51.	0.9
47.	0.9
43.	0.8
40.	0.7
36.	0.7
33.	0.6
29.	0.5
25.	0.5
22.	0.4
18.	0.3
14.	0.3
11.	0.2
7.	0.1
4.	0.1
0.	0.0

**T=1900Δt**



SIMULACION A: 0.08 MIN.



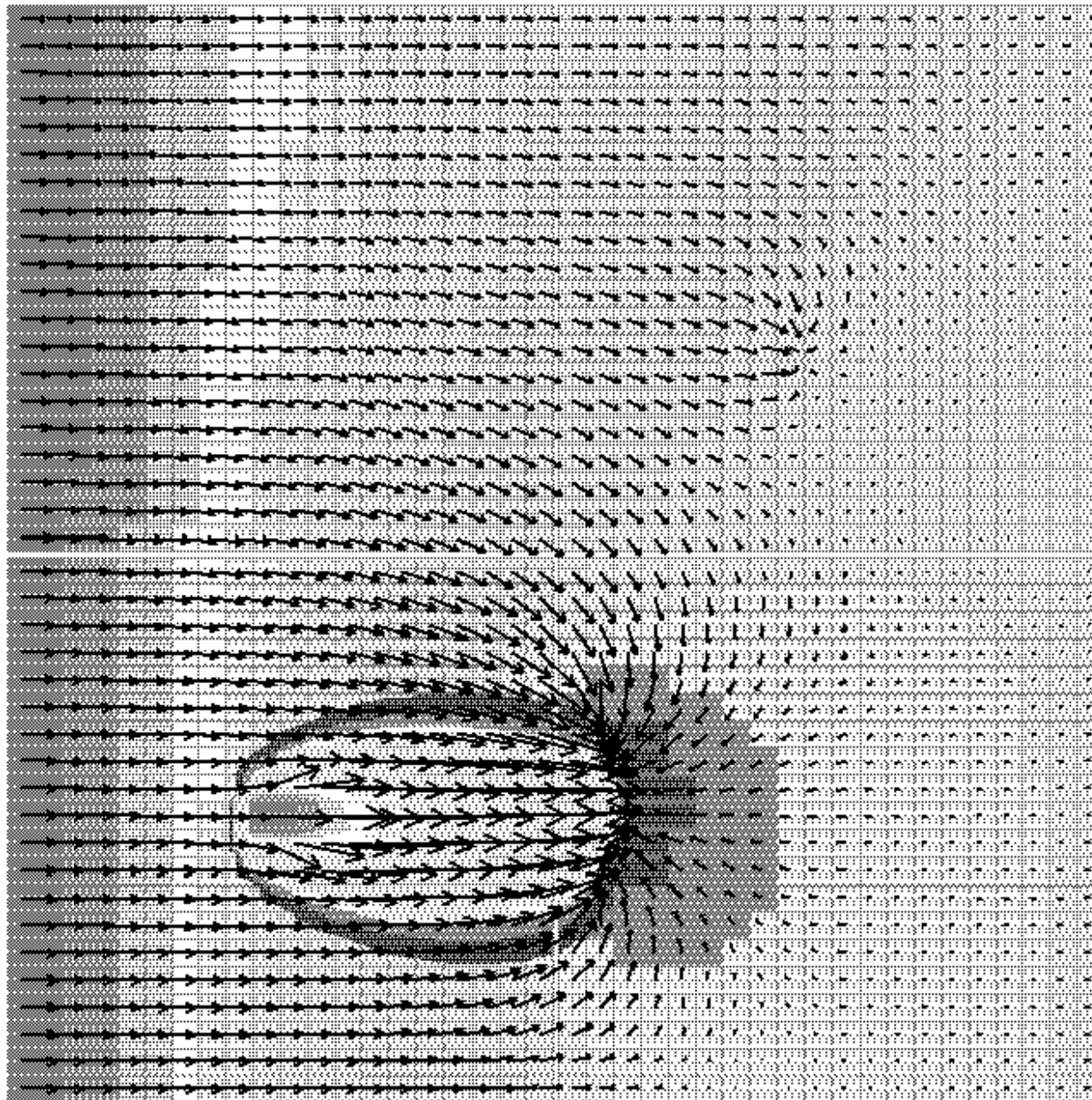
PRESS (Pa) CONC



- 54. 1.0
- 51. 0.9
- 47. 0.9
- 43. 0.8
- 40. 0.7
- 36. 0.7
- 33. 0.6
- 29. 0.5
- 25. 0.5
- 22. 0.4
- 18. 0.3
- 14. 0.3
- 11. 0.2
- 7. 0.1
- 4. 0.1
- 0. 0.0

$T=2000\Delta t$

SIMULACION A: 0.08 MIN.



PRESS (Pa) CONC

54. 1.0

51. 0.9

47. 0.9

43. 0.8

40. 0.7

36. 0.7

33. 0.6

29. 0.5

25. 0.5

22. 0.4

18. 0.3

14. 0.3

11. 0.2

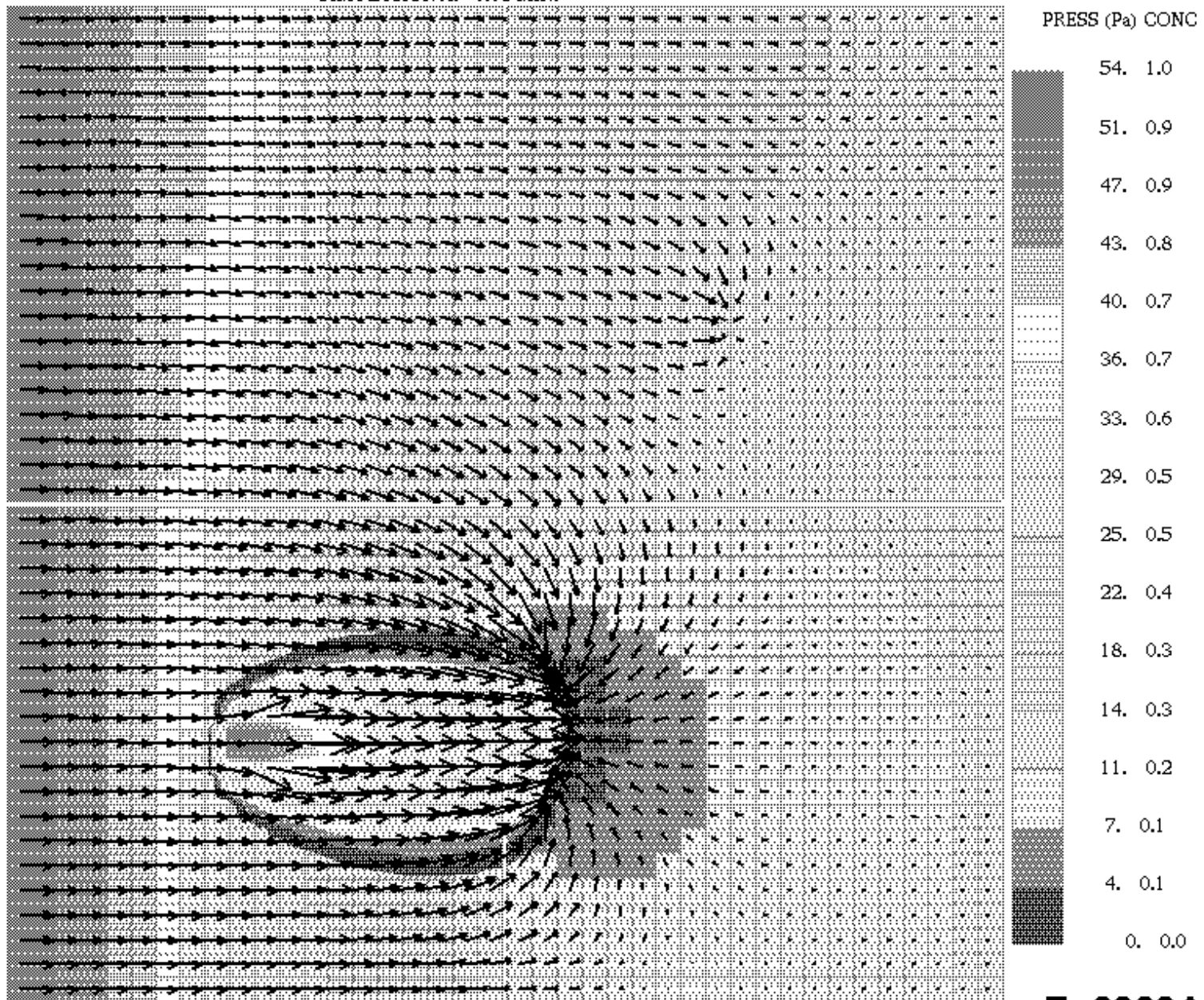
7. 0.1

4. 0.1

0. 0.0

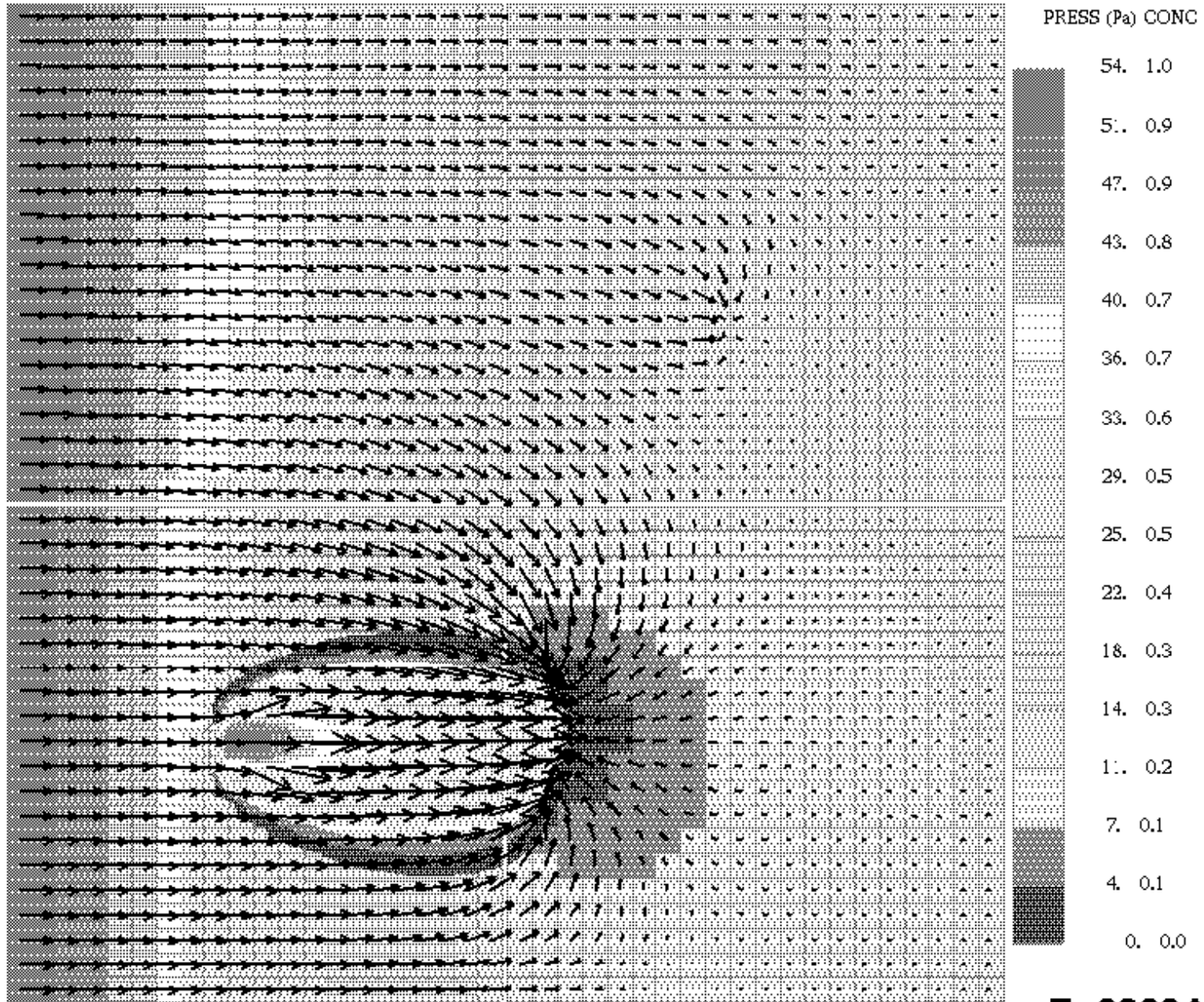
$T=2100\Delta t$

SIMULACION A: 0.08 MIN.



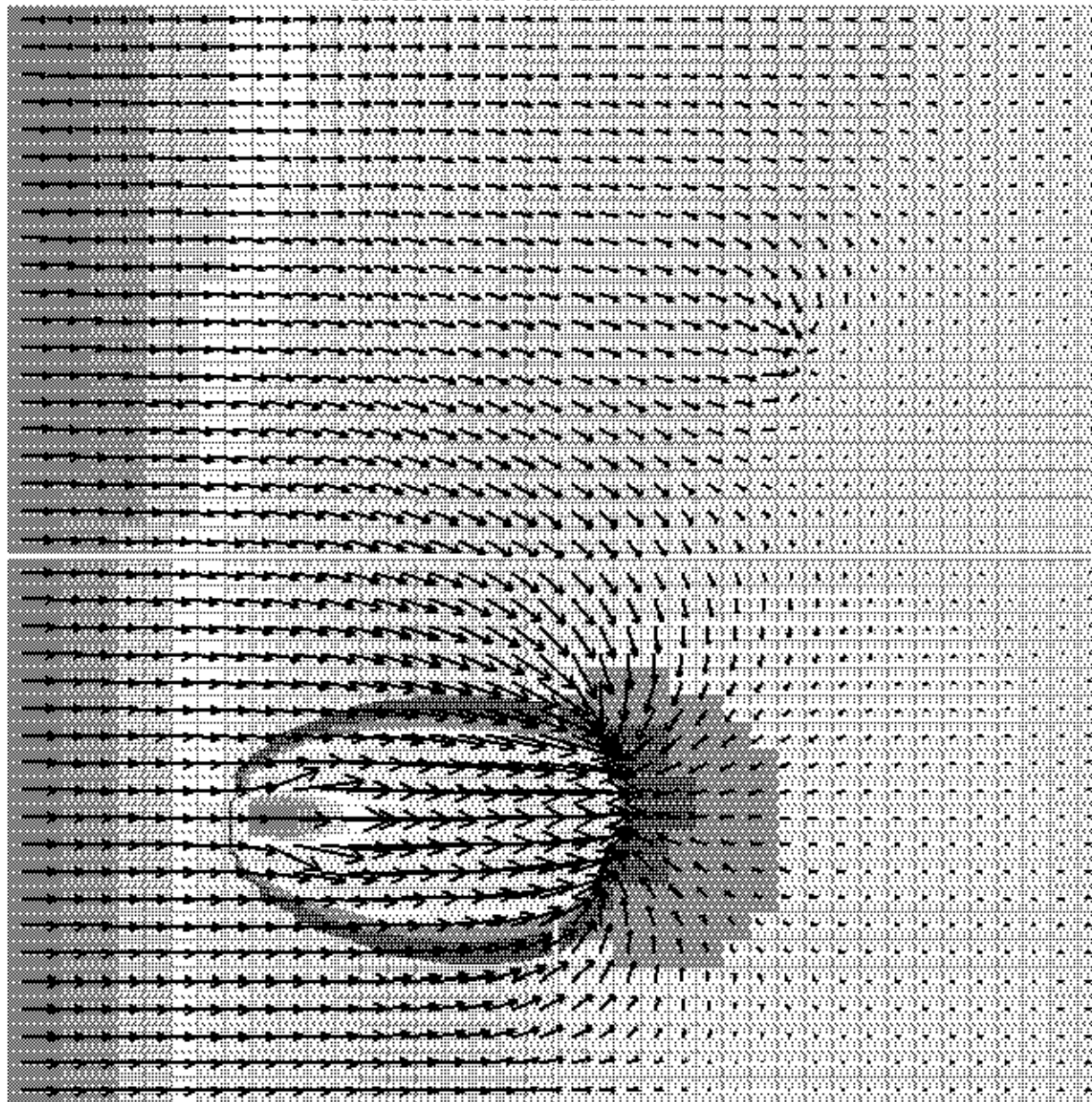
$T=2200\Delta t$

SIMULACION A: 0.09 MIN.



$T=2300\Delta t$

SIMULACION A: 0.09 MIN.



PRESS (Pa) CONC

54. 1.0

51. 0.9

47. 0.9

43. 0.8

40. 0.7

36. 0.7

33. 0.6

29. 0.5

25. 0.5

22. 0.4

18. 0.3

14. 0.3

11. 0.2

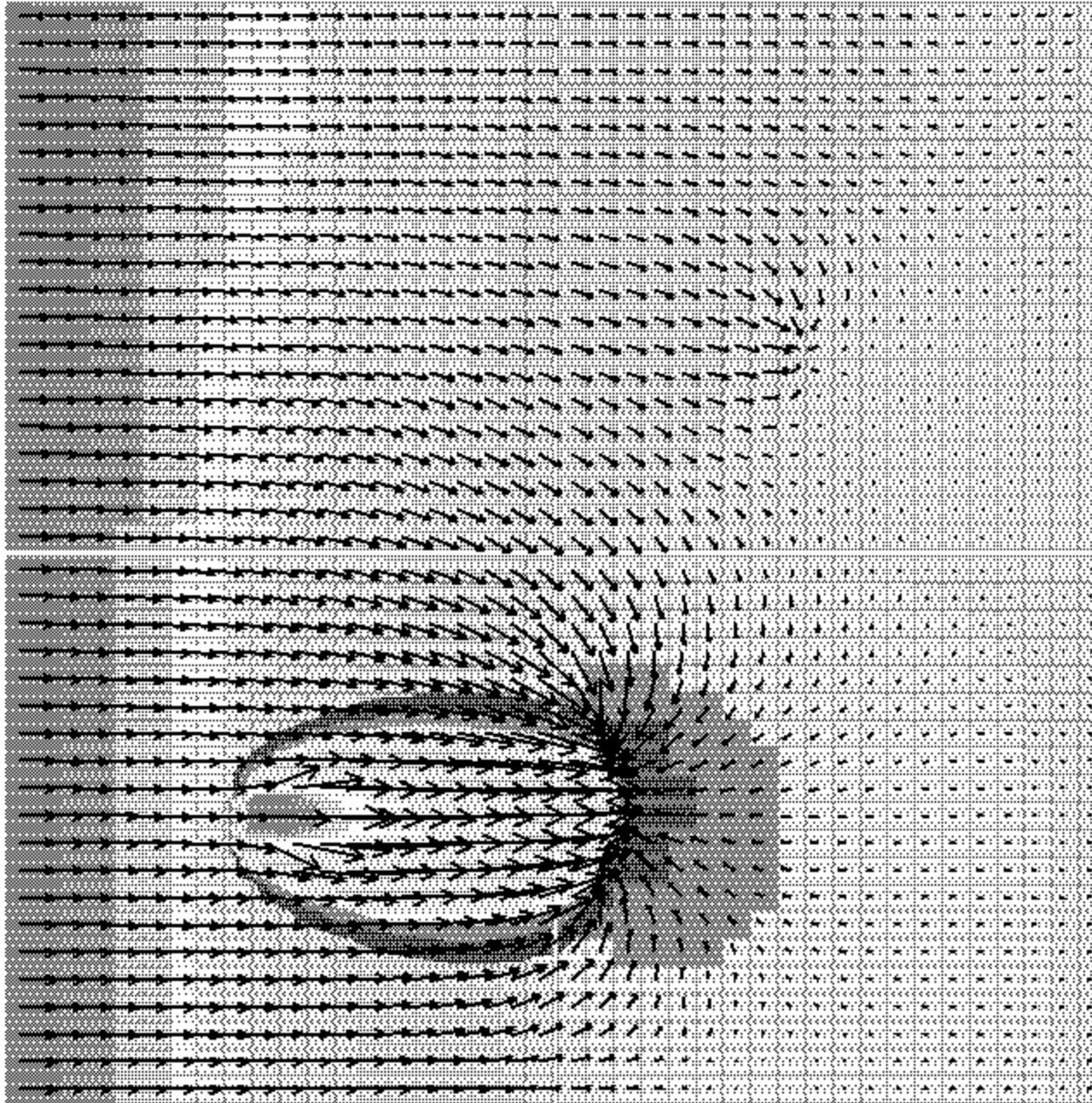
7. 0.1

4. 0.1

0. 0.0

**T=2400Δt**

SIMULACION A: 0.09 MIN.



PRESS (Pa) CONC



- 54. 1.0
- 51. 0.9
- 47. 0.9
- 43. 0.8
- 40. 0.7
- 36. 0.7
- 33. 0.6
- 29. 0.5
- 25. 0.5
- 22. 0.4
- 18. 0.3
- 14. 0.3
- 11. 0.2
- 7. 0.1
- 4. 0.1
- 0. 0.0

**T=2500Δt**