



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

INSTITUTO DE GEOFÍSICA

POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA

FORMULACIÓN VARIACIONAL
Y APROXIMACIÓN DE ELEMENTO FINITO
PARA FLUJO MULTIFÁSICO EN EL SUBSUELO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS

PRESENTA

NORBERTO CARMEN VERA GUZMÁN

TUTOR: DR. GONZALO ALDUNCIN GONZÁLEZ

MÉXICO, D.F. 2005



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 mi esposa: Antonia.
A mis padres: Guadalupe y Josefa.

Por su apoyo, comprensión y paciencia.

A mis hijos y a mis hermanos.

AGRADECIMIENTOS

Mi agradecimiento sincero para el Dr. Gonzalo Alduncin, por su invitación a transitar por el camino de la autenticidad científica, por el tiempo dedicado, ... , por su amistad.

Agradezco también a los investigadores:

Dr. Jorge Esquivel.
Dr. Luis Marín.
Dr. Adrián Ortega.
Dra. Leticia Flores.
Dr. David Parra.
Dr. Oscar Escolero.
Dra. Ma. Aurora Armienta.

Su colaboración en muy diversas formas, para desarrollar y concluir este trabajo.

*

Este trabajo fué parcialmente apoyado por el Programa de Yacimientos Naturalmente Fracturados del Instituto Mexicano del Petróleo, IMP.

Contenido

Introducción	1
Capítulo 1. CONSTRUCCIÓN DE MODELOS FÍSICOS	
1.1 PRINCIPIOS BÁSICOS	3
1.2 MODELO COMPRESIBLE DARCIANO	9
1.3 MODELO INCOMPRESIBLE DARCIANO	10
1.4 MODELO DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES	10
1.5 MODELO BIFÁSICO DE FLUJO	11
1.6 MODELO MACROHÍBRIDO BIFÁSICO DE FLUJO	17
Capítulo 2. FORMULACIÓN VARIACIONAL DE PROBLEMAS	
2.1 ECUACIONES SUBDIFERENCIALES	20
2.2 FORMULACIÓN VARIACIONAL CLÁSICA	21
2.3 FORMULACIONES VARIACIONALES PRIMAL Y DUAL	25
2.4 FORMULACION VARIACIONAL MACROHÍBRIDA MIXTA	28
2.5 FORMULACIÓN VARIACIONAL MACROHÍBRIDA MIXTA PARA FLUJO BIFÁSICO	32
Capítulo 3. MODELOS MACROHÍBRIDOS MIXTOS DISCRETOS	
3.1 DISCRETIZACIONES ESPACIALES	37
3.2 MODELO MACROHÍBRIDO MIXTO DISCRETO BIFÁSICO	41
Capítulo 4. ALGORITMOS DE PUNTO PRÓXIMO	
4.1 ALGORITMOS ITERATIVOS PARA DESIGUALDADES VARIACIONALES MIXTAS	48
4.2 GENERACIÓN DE LOS ALGORITMOS PRIMAL Y MIXTO TIPO UZAWA	49

4.3 MÉTODOS DE RESOLVENTES Y ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN NUMÉRICA EN EL TIEMPO	54
4.4 ESQUEMA SEMI-IMPLÍCITO DE EULER PARA EL PROBLEMA MIXTO EVOLUTIVO PRIMAL	55
4.5 ESQUEMAS DE EULER PARA EL PROBLEMA MIXTO EVOLUTIVO DUAL	56
4.6 ESQUEMAS DE DIVISIÓN DE OPERADORES PARA EL PROBLEMA MIXTO EVOLUTIVO DUAL	58
4.7 ALGORITMOS DE PUNTO PRÓXIMO EN PARALELO	60
Capítulo 5. MODELO COMPUTACIONAL TRIDIMENSIONAL	
5.1 ESTRUCTURA DEL MODELO COMPUTACIONAL	69
5.2 VERSION PARA DOS SUBDOMINIOS	71
Capítulo 6. RESULTADOS DEL MODELO BIFÁSICO	
6.1 RESULTADOS	82
6.1 PRIMER EXPERIMENTO	83
6.2 SEGUNDO EXPERIMENTO	85
FIGURAS	86
CONCLUSIONES	95
REFERENCIAS	97

**MODELACIÓN VARIACIONAL Y APROXIMACIÓN
DE ELEMENTO FINITO PARA FLUJO
MULTIFÁSICO EN EL SUBSUELO**

Norberto Carmen Vera Guzmán

*

SUMMARY

In this work a computational model is developed for the incompressible and immiscible two-phase flow problem in porous media. The problem is presented on the basis of two coupled mixed models: a total velocity-global pressure (\mathbf{u}, p) -problem and a saturation flow-saturation (\mathbf{w}, s) -problem, on a three-dimensional spatial domain Ω , with boundary $\partial\Omega$. Next, each mixed problem is reformulated as a family of mixed subproblems with local dependent fields (\mathbf{u}_e, p_e) and (\mathbf{w}_e, s_e) on nonoverlapping subdomains Ω_e , with internal boundaries $\Gamma_e = \partial\Omega_e \cap \Omega$, $e = 1, 2, \dots, E$, in order to obtain the macro-hybrid mixed version of the problem. The macro-hybrid mixed variational formulation of the two-phase problem is then given by incorporating the boundary conditions on the external boundaries $\partial\Omega_e \setminus \Gamma_e$, and modeling the continuity constraints of transmission across the interfaces $\Gamma_{ef} = \Gamma_e \cap \Gamma_f$, $1 \leq e < f \leq E$, in terms of a subdifferential problem. The transmission subdifferential subproblem establishes the duality relation between the global pressures r_e and the saturations ρ_e on the internal boundaries Γ_e , $e = 1, 2, \dots, E$. The discretization of the two coupled mixed problems is produced by finite dimensional internal approximations of the continuous framework, and implemented via finite element techniques; the discrete fields of the computational model are in this way: $\{\mathbf{u}_e, \mathbf{w}_e\} \in H(\text{div}; \{\Omega_e\})$, $\{p_e, s_e\} \in L^2(\{\Omega_e\})$, $\{r_e\} \in H^{1/2}(\{\Gamma_e\})$ and $\{\rho_e\} \in H^{-1/2}(\{\Gamma_e\})$.

With the purpose of generating parallel iterative algorithms for the numerical resolution of the macro-hybrid mixed finite element schemes, exact penalized augmentations are introduced. In this way, proximal-point algorithms are produced, which complete the computational modeling of the two-phase flow problem.

Finally, several computational experiments are performed and analyzed. In these experiments different boundary conditions and domain decompositions are considered, and the results are presented in a chromatic-vectorial format.

RESÚMEN

En este trabajo se desarrolla un modelo computacional para el problema de flujo bifásico inmiscible incompresible en medios porosos. El problema es planteado en base a dos modelos mixtos acoplados: velocidad total-presión global (\mathbf{u}, p) y flujo de saturación-saturación (\mathbf{w}, s) sobre un dominio Ω . A continuación, cada problema mixto (\mathbf{u}, p) y (\mathbf{w}, s) es replanteado como un conjunto de subproblemas mixtos (\mathbf{u}_e, p_e) y (\mathbf{w}_e, s_e) sobre subdominios disjuntos Ω_e , obteniéndose la versión macrohíbrida mixta del problema. En seguida, la versión macrohíbrida mixta es formulada variacionalmente, incorporando las condiciones de frontera sobre $\partial\Omega_e \setminus \Gamma_e$ y restricciones de continuidad de los campos sobre Γ_e , en forma subdiferencial para cada subproblema. Para manejar las restricciones de continuidad, se introducen dos nuevos campos: la presión global de frontera interna r_e y la saturación de frontera interna ρ_e . Hecho esto, se replantean los subproblemas mixtos en espacios de dimensión finita, asociando los campos: $\{\mathbf{u}_e, \mathbf{w}_e\} \in H(\text{div}, \Omega_e)$, $\{p_e, s_e\} \in L^2(\Omega_e)$, $\{r_e\} \in H^{1/2}(\Gamma_e)$ y $\{\rho_e\} \in H^{-1/2}(\Gamma_e)$, y obteniendo de esta manera, la versión macrohíbrida mixta discreta del problema.

Por último, se construye la versión aumentada del modelo macrohíbrido mixto discreto, y con base en ella se plantea un algoritmo de punto próximo para su resolución. Este algoritmo se codifica para obtener el modelo computacional para el problema de flujo bifásico.

Con el modelo desarrollado, se realizan distintos experimentos numéricos considerando diversas condiciones de frontera y un número variable de subdominios -uno a siete-, con el propósito de establecer su funcionalidad y estabilidad. Los resultados de dichos experimentos, se presentan en un formato cromático-vectorial.

Introducción

Considerando la gran importancia práctica que tiene la modelación computacional de flujo multifásico en la explotación de mantos petrolíferos y agua subterránea, el tratamiento de problemas de contaminación de aguas subterráneas y superficiales, así como la intrusión salina en acuíferos costeros [8, 43, 44, 45, 47], resulta natural que exista gran interés en su estudio y desarrollo dentro del ámbito de la comunidad científica.

Con base en esta consideración, en este trabajo se plantea modelar computacionalmente el flujo de dos fluidos inmiscibles incompresibles en un medio poroso, utilizando una metodología que contempla: formulaciones variacionales macrohíbridas mixtas, aproximaciones de elemento finito mixto y algoritmos de resolución de punto próximo.

Esta metodología, que en el escenario actual de la modelación computacional involucra conceptos como modelos macrohíbridos, descomposición de dominio, elementos finitos mixtos y programación en paralelo, ofrece las herramientas básicas que permiten tratar dificultades asociadas a problemas de flujo multifásico tales como: una aproximación numérica adecuada de los campos de velocidad y concentración; la presencia de altas heterogeneidades y anisotropías en los parámetros físicos; redes de fracturas en las diversas formaciones geológicas; la escala espacial de los sistemas y su irregularidad geométrica.

Para abordar los problemas asociados con alta heterogeneidad y anisotropía que presentan las propiedades físicas de un reservorio, es necesario tener la mejor aproximación posible del campo de velocidades cuando se estudian fenómenos de transporte, lo que nos lleva a considerar una formulación mixta del problema para aproximar simultáneamente los campos primal y dual. Una de las metodologías con que se cuenta en la actualidad para tratar este tipo de problemas es la de elementos finitos mixtos, que ha sido ampliamente estudiada [21, 26], y aplicada a la modelación de flujo multifásico en el subsuelo [27, 28, 29], teniendo en la actualidad bases firmes para su aplicación sistemática a este tipo de problemas.

Al considerar sistemas espaciales tridimensionales, surge de manera natural la necesidad de un enfoque macrohíbrido para su modelación, en donde el sistema global es descompuesto en un conjunto de subsistemas interactuando a través de sus fronteras internas, vía condiciones de transmisión para establecer la continuidad de los campos primales y duales [30]. Con base en este enfoque, la interacción de los subsistemas puede ser realizada por medio de procesos computacionales en paralelo, en donde se pueden utilizar varias estrategias para el proceso de sincronización, como pueden ser modelos con restricciones y métodos de dualización conforme y no-conforme.

De acuerdo con lo anterior, en la simulación numérica de flujo bifásico tridimensional en un medio poroso que se pretende realizar en este trabajo, se hará uso de los siguientes conceptos: formulaciones variacionales macrohíbridas, aproximaciones de elemento finito mixto y algorit-

mos iterativos de aproximación. Siguiendo el trabajo desarrollado por Alduncin [13, 17], se hará uso de la metodología subdiferencial para la modelación variacional macrohíbrida del problema, y la metodología de resolventes para generar algoritmos iterativos de resolución dualidad-penalización tipo Uzawa.

Los aspectos fundamentales que serán desarrollados en este trabajo para la generación del modelo computacional son los siguientes.

- a) Planteamiento de modelos físicos desde un punto de vista de la Mecánica del Continuo, con base en ecuaciones de balance, ecuaciones constitutivas y restricciones.
- b) Construcción de modelos variacionales mixtos para la aproximación simultánea de los campos primales y duales con condiciones de frontera generales.
- c) Generación de modelos variacionales macrohíbridos mixtos, con la restricción de continuidad de los campos primales y duales a través de las fronteras internas, para tratar las discontinuidades en los parámetros físicos de las estructuras geológicas y redes de fracturas.
- d) Derivación de los algoritmos numéricos de dualidad y penalización exacta tipo Uzawa, para producir sistemas numéricos bien condicionados y procesos recursivos apropiados para el cómputo en paralelo.

El trabajo ha sido estructurado de la siguiente manera. Los capítulos 1 a 4 están divididos de manera sistemática en dos partes. En la primera se presentan los conceptos teóricos y metodológicos que serán usados durante el desarrollo de la tesis, y en la segunda, se aplican éstos al planteamiento, formulación, aproximación y resolución del problema bajo estudio.

En el capítulo 5 se presentan las características que tiene el software desarrollado para simular el flujo bifásico tridimensional en medios porosos, indicando geometrías, tipo de elemento finito usado y relación entre las mallas de los subdominios con las mallas de frontera interna.

En el capítulo 6 se muestran los resultados obtenidos de diferentes simulaciones realizadas, considerando diversos escenarios, diferentes propiedades físicas, distintos mallados y condiciones de frontera.

Por último, se presentan las conclusiones con base en los planteamientos hechos y los resultados obtenidos.

Capítulo 1

CONSTRUCCIÓN DE MODELOS FÍSICOS

INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presentan los conceptos básicos físicos y matemáticos, que se utilizan en el planteamiento de los modelos físicos. En la primera sección se hace la presentación de dichos conceptos, y en las secciones posteriores, se utilizan en la construcción de diversos modelos físicos de flujo en medios porosos.

En la última sección de este capítulo, con base en los conceptos presentados con anterioridad, se construye un modelo de flujo bifásico inmiscible incompresible en un medio poroso, tema central de este trabajo, y se presentan algunas de las posibles formas en las que se puede abordar este problema, indicando las razones por las que, en este trabajo, se adopta un enfoque macrohíbrido mixto del modelo.

Los elementos usados en el planteamiento del modelo físico para el problema de flujo bifásico, contemplan conceptos como: presión global, presión capilar, permeabilidad relativa, velocidad total, saturación y flujo de saturación. Dichos conceptos son de dominio público y son ampliamente usados dentro del ámbito de la Mecánica Computacional [4, 6, 7, 8, 25]. Otros conceptos adicionales utilizados en este trabajo son: modelos macrohíbridos y macrohíbridos mixtos, que permiten el replanteamiento de un problema global como un conjunto de subproblemas, y el planteamiento de un problema considerando su campo primal o dual y sus correspondientes flujos [21, 26, 27, 28, 29, 30, 31]. Estos conceptos, han adquirido gran importancia en la actualidad, dentro del área de la modelación computacional.

1.1 PRINCIPIOS BÁSICOS

Para desarrollar el objetivo principal de este capítulo, consideramos de utilidad presentar algunos de los conceptos básicos que son usados en la construcción de los modelos, con el propósito de hacer mas clara la exposición.

Entre los elementos básicos que se utilizan para el planteamiento de un modelo físico, se consideran los siguientes.

a) *Ecuaciones de balance,*

- b) *Ecuaciones constitutivas* y,
 c) *Ecuaciones de estado*.

Las primeras expresan como cambia en el tiempo de manera global, la masa, la energía, el momentum, el campo eléctrico, etc. dentro del sistema debido a fuentes, sumideros y a la interacción con su medio ambiente. Las segundas expresan como se mueven o deforman los distintos materiales, cuando se encuentran sujetos a esfuerzos o a una distribución de fuerzas. Las últimas establecen las relaciones que deben guardar los distintos campos que describen los cuerpos materiales.

Los conceptos anteriores y sus correspondientes expresiones matemáticas, son usados para el planteamiento de modelos físicos que describen sistemas reales dentro del ámbito de la Mecánica Computacional, la que a su vez, permite realizar simulaciones para conocer el comportamiento de tales sistemas.

Las entidades físicas con las que se trabaja en estos modelos, están expresadas desde un punto de vista de la Mecánica del Continuo, en donde cada punto material está relacionado con un punto espacial [1], y los materiales pueden idealizarse como constituidos de forma continua, sin huecos ni separaciones en su interior. Este concepto es el utilizado para expresar cantidades como masa, energía, momentum, etc.

Entre los conceptos básicos que son utilizados en la construcción de un Modelo Físico, se encuentran los siguientes.

El Teorema de Transporte de Volumen,

El Teorema de Transporte de Reynolds y,

El Principio de Conservación de Masa para un Volumen de Control.

Estos conceptos tienen gran importancia dado que, con base en ellos, se establecen las ecuaciones de balance, uno de los elementos básicos utilizados en la construcción de los modelos físicos. Una presentación detallada de cada uno de estos conceptos, se encuentra en [1].

Teorema 1.1 **Teorema de Transporte de Volumen**

Sea \mathcal{B} un cuerpo y \mathcal{P} una parte de él. Entonces, para cualquier tiempo $t > 0$, se tiene

$$\frac{d}{dt}\text{vol}(\mathcal{P}_t) = \int_{\mathcal{P}} (\det \mathbf{F})^\bullet dV = \int_{\mathcal{P}_t} \text{div} \mathbf{v} dV = \int_{\partial \mathcal{P}_t} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (1.1)$$

En esta expresión $(\det \mathbf{F})^\bullet$ y $\text{div} \mathbf{v}$ representan la razón de cambio de volumen por unidad de volumen, $(\det \mathbf{F})^\bullet$ es la medida por unidad de volumen en la configuración de referencia y, $\text{div} \mathbf{v}$ es la medida por unidad de volumen en la configuración deformada.

Para establecer este resultado, consideremos un cuerpo \mathcal{B} y escribimos

$$\mathcal{P}_t = \chi(\mathcal{P}, t), \quad (1.2)$$

para la región del espacio ocupada por \mathcal{P} al tiempo t , entonces

$$\text{vol}(\mathcal{P}_t) = \int_{\mathcal{P}_t} dV. \quad (1.3)$$

representa el volumen de \mathcal{P} al tiempo t .

Ahora bien, usando el gradiente de la deformación $\mathbf{F} = \mathbf{grad}\boldsymbol{\chi}$, la ecuación anterior se puede expresar como

$$\text{vol}(\mathcal{P}_t) = \int_{\mathcal{P}} (\det \mathbf{F}) dV, \quad (1.4)$$

entonces, la derivada temporal de $\text{vol}(\mathcal{P}_t)$ se puede expresar como

$$\frac{d(\text{vol}(\mathcal{P}_t))}{dt} = \int_{\mathcal{P}} (\det \mathbf{F})^\bullet dV. \quad (1.5)$$

Desarrollando el integrando de la expresión anterior se tiene,

$$(\det \mathbf{F})^\bullet = (\det \mathbf{F}) \text{tr}(\mathbf{F}^\bullet \mathbf{F}^{-1}) = (\det \mathbf{F}) \text{tr} \mathbf{L}_m,$$

pero

$$\text{tr} \mathbf{L} = \text{tr}(\mathbf{grad} \mathbf{v}) = \text{div} \mathbf{v},$$

en consecuencia

$$(\det \mathbf{F})^\bullet = (\det \mathbf{F})(\text{div} \mathbf{v})_m.$$

Entonces, la derivada temporal de $\text{vol}(\mathcal{P}_t)$ queda expresada como

$$\frac{d(\text{vol}(\mathcal{P}_t))}{dt} = \int_{\mathcal{P}} (\det \mathbf{F})(\text{div} \mathbf{v})_m dV = \int_{\mathcal{P}_t} (\text{div} \mathbf{v}) dV. \quad (1.6)$$

La ecuación anterior representa el Teorema de Transporte de Volumen que de manera secuencial se puede expresar como,

$$\begin{aligned} \frac{d(\text{vol}(\mathcal{P}_t))}{dt} &= \int_{\mathcal{P}} (\det \mathbf{F})^\bullet dV = \int_{\mathcal{P}} (\det \mathbf{F})(\text{div} \mathbf{v})_m dV \\ &= \int_{\mathcal{P}_t} (\text{div} \mathbf{v}) dV = \int_{\partial \mathcal{P}_t} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA. \end{aligned} \quad (1.7)$$

El Teorema de Transporte de Reynolds, establece lo siguiente.

Teorema 1.2. Teorema de Transporte de Reynolds.

Sea \mathcal{B} un cuerpo y \mathcal{P} una parte de el, y consideremos un campo espacial suave Φ con valores escalares o vectoriales. Entonces, para cualquier $\mathcal{P} \subset \mathcal{B}$ y para cualquier $t > 0$, se tiene que

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \Phi dV = \int_{\mathcal{P}_t} (\Phi^\bullet + \Phi \text{div} \mathbf{v}) dV, \quad (1.8)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \Phi dV = \int_{\mathcal{P}_t} \Phi' dV + \int_{\partial \mathcal{P}_t} \Phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA,$$

donde, la notación Φ^\bullet y Φ' indican $\frac{d\Phi}{dt}$ y $\frac{\partial \Phi}{\partial t}$ respectivamente.

Para establecer este resultado se hace lo siguiente. Con base en la expresión (1.6)

$$\int_{\mathcal{P}} (\text{div} \mathbf{v})_m \det \mathbf{F} dV = \int_{\mathcal{P}_t} \text{div} \mathbf{v} dV,$$

se tiene que

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \Phi dV = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}} (\Phi_m \det \mathbf{F}) dV = \int_{\mathcal{P}} (\Phi_m \det \mathbf{F})^\bullet dV. \quad (1.9)$$

Ahora bien

$$\begin{aligned} (\Phi_m \det \mathbf{F})^\bullet &= \Phi_m^\bullet \det \mathbf{F} + \Phi_m (\det \mathbf{F})^\bullet \\ &= \Phi_m^\bullet \det \mathbf{F} + \Phi_m \det \mathbf{F} (\operatorname{div} \mathbf{v})_m \\ &= (\Phi^\bullet + \Phi \operatorname{div} \mathbf{v})_m \det \mathbf{F}, \end{aligned}$$

entonces

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \Phi dV &= \int_{\mathcal{P}} (\Phi_m \det \mathbf{F})^\bullet dV \\ &= \int_{\mathcal{P}} (\Phi^\bullet + \Phi \operatorname{div} \mathbf{v})_m \det \mathbf{F} dV = \int_{\mathcal{P}_t} (\Phi^\bullet + \Phi \operatorname{div} \mathbf{v}) dV. \end{aligned} \quad (1.10)$$

con lo que se obtiene la primera parte del Teorema 1.2.

Para la segunda parte considérese la identidad

$$\begin{aligned} \Phi^\bullet &= \Phi' + \mathbf{grad} \Phi \cdot \mathbf{v} \\ &= \Phi' + \operatorname{div}(\Phi \mathbf{v}) - \Phi \operatorname{div} \mathbf{v}, \end{aligned}$$

entonces se tiene la expresión

$$\Phi^\bullet + \Phi \operatorname{div} \mathbf{v} = \Phi' + \operatorname{div}(\Phi \mathbf{v}), \quad (1.11)$$

sustituyendo (1.11) en (1.10) y haciendo uso del Teorema de la Divergencia se tiene

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \Phi dV = \int_{\mathcal{P}_t} \Phi' dV + \int_{\partial \mathcal{P}_t} \Phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA, \quad (1.12)$$

con lo cual se tiene la segunda parte del Teorema 1.2.

Para establecer el Principio de Conservación de Masa para un Volumen de Control, primero se establece éste para regiones en movimiento, y a continuación se hace para una región fija en el espacio. Para la primera parte se tiene lo siguiente.

Considerando que la masa es una distribución continua, dada cualquier deformación \mathbf{f} de un cuerpo \mathcal{B} , existe un campo de densidad $\rho_{\mathbf{f}}$ sobre $\mathbf{f}(\mathcal{B})$. Entonces la masa $m(\mathcal{P})$ de cualquier parte \mathcal{P} de \mathcal{B} esta dada por

$$m(\mathcal{P}) = \int_{\mathbf{f}(\mathcal{P})} \rho_{\mathbf{f}} dV. \quad (1.13)$$

Ahora bien, la masa de cualquier parte \mathcal{P} de \mathcal{B} no puede ser alterada por una deformación \mathbf{f} , en consecuencia se tiene que

$$m(\mathcal{P}) = \int_{\mathbf{f}(\mathcal{P})} \rho_{\mathbf{f}} dV = \int_{\mathbf{g}(\mathcal{P})} \rho_{\mathbf{g}} dV \quad \forall \mathcal{P} \subset \mathcal{B} \quad \text{y} \quad \forall \mathbf{f}, \mathbf{g}. \quad (1.14)$$

Sea ρ_0 el campo de densidad $\rho_{\mathbf{f}}$ cuando $\mathbf{f}(\mathbf{p}) = \mathbf{p}$ para cualquier $\mathbf{p} \in \mathcal{B}$, entonces $\rho_0(\mathbf{p})$ indica la densidad en \mathbf{p} en la configuración de referencia. Con base en la densidad de referencia ρ_0 , se establece la densidad en todas las deformaciones de acuerdo a lo siguiente.

Sea \mathbf{f} una deformación de \mathcal{B} y $\mathbf{F} = \mathbf{grad} \mathbf{f}$, entonces la densidad de referencia $\rho_0(\mathbf{p})$ y la densidad $\rho_{\mathbf{f}}(\mathbf{x})$ en el lugar $\mathbf{x} = \mathbf{f}(\mathbf{p})$ están relacionadas por

$$\rho_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}) \det \mathbf{F}(\mathbf{p}) = \rho_0(\mathbf{p}). \quad (1.15)$$

De manera general, dado un movimiento χ de \mathcal{B} siempre se puede escribir $\rho_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, t)$ para la densidad en el lugar $\mathbf{x} \in \mathcal{B}_t$ en la deformación $\chi(\cdot, t)$. De esta manera $\rho(\mathbf{x}, t)$ está definida por

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_{\chi(\cdot, t)}(\mathbf{x}) = \frac{\rho_0(\mathbf{p})}{\det \mathbf{F}(\mathbf{p}, t)}, \quad (1.16)$$

de donde se desprende que, $\rho(\mathbf{x}, t)$ es la descripción espacial de $\rho_0(\mathbf{p})/\det \mathbf{F}(\mathbf{p}, t)$ y es referida como la densidad en el movimiento $\chi(\cdot, t)$.

Como consecuencia de lo anterior, la masa $m(\mathcal{P})$ de cualquier parte \mathcal{P} de \mathcal{B} dado un movimiento χ , se puede expresar como

$$m(\mathcal{P}) = \int_{\mathcal{P}_t} \rho(\mathbf{x}, t) dV_{\mathbf{x}} \equiv \int_{\mathcal{P}_t} \rho dV, \quad (1.17)$$

y dado que la masa de un cuerpo no cambia bajo una deformación,

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \rho dV = 0. \quad (1.18)$$

La ecuación anterior expresa el principio de conservación de masa para una region \mathcal{P}_t que se mueve con el cuerpo.

Para la segunda parte del principio de conservación de masa, considérese una region \mathcal{R} fija en el espacio, llamada un volumen de control. Por un volumen de control en un tiempo t , se entiende una region regular acotada \mathcal{R} con $\mathcal{R} \subset \mathcal{B}_\tau$ para todo τ en alguna vecindad de t . En muchas ocasiones resulta conveniente concentrarse en lo que ocurre en esta región fija del espacio, en lugar de observar el movimiento de los cuerpos.

Con base en este enfoque, el principio de conservación de masa considerando un volumen de control se expresa de la siguiente manera.

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{R}} \rho(\mathbf{x}, t) dV = - \int_{\partial \mathcal{R}} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dA_{\mathbf{x}}. \quad (1.19)$$

Esta ecuación establece la Conservación de Masa para un Volumen de Control y afirma que: la razón con que se incrementa la masa en \mathcal{R} , es igual al flujo de masa hacia el interior de \mathcal{R} a través de su frontera.

Aquí, \mathbf{n} es el vector normal unitario a $\partial \mathcal{R}$, $\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ representa el flujo de masa por unidad de area saliendo de \mathcal{R} a través de su frontera.

Un último concepto que se enunciará sin demostración en esta seccion, es el Teorema de Localización. Este concepto tiene importancia debido a que permite deducir las ecuaciones de campo locales a partir de las formulaciones globales. Dicho Teorema establece lo siguiente.

Teorema 1.3. Teorema de Localización.

Sea Φ un campo escalar o vectorial continuo sobre un conjunto abierto \mathcal{R} . Entonces dado cualquier $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{R}$ se tiene que

$$\Phi(\mathbf{x}_0) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\text{vol}(\Omega_\delta)} \int_{\Omega_\delta} \Phi dV, \quad (1.20)$$

donde $\Omega_\delta(\delta > 0)$ es una bola cerrada de radio δ centrada en \mathbf{x}_0 . Por lo tanto, si

$$\int_{\Omega} \Phi dV = 0, \quad (1.21)$$

para cualquier bola cerrada $\Omega \subset \mathcal{R}$, entonces

$$\Phi = 0. \quad (1.22)$$

Los conceptos anteriores resultan ser básicos en la construcción de modelos físicos, ya que es a partir de estos que se obtienen las ecuaciones de balance globales y locales. Su importancia será evidente en la siguiente sección.

1.2 MODELO COMPRESIBLE DARCIANO

En esta seccion se hará uso de los conceptos anteriores con el propósito de plantear algunos modelos físicos relacionados con el flujo y transporte de fluidos en el subsuelo. De manera concreta, se plantearán los modelos de flujo monofásico Darciano Compresible e Incompresible considerando una formulación mixta velocidad-presión, el modelo primal de transporte de contaminantes y por ultimo, se plantearán las ecuaciones que constituyen el modelo de flujo bifásico en un medio poroso. Para plantear el primero de ellos, considérese lo siguiente.

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un dominio fijo tridimensional, con frontera $\partial\Omega$ Lipschitz continua. Físicamente, este dominio representa un medio poroso en el cual se plantearán los modelos físicos de flujo monofásico, de transporte y bifásico, considerando que el campo macroscópico de velocidad de Darcy \mathbf{u} , es válido a este nivel [3, 4].

Considérese en un tiempo $t \in (0, T), T > 0$ una parte material $\mathcal{P}_t(\mathbf{x})$ del dominio fijo Ω , alrededor del punto $\mathbf{x} \in \Omega$. Entonces, de acuerdo con el Teorema de Transporte de Reynolds, la variación en el tiempo de la masa m contenida en \mathcal{P}_t considerando fuentes y sumideros en el interior de \mathcal{P}_t , puede ser expresada como,

$$\frac{d}{dt}m(\mathcal{P}_t) = \int_{\mathcal{P}_t} \left(\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\mathbf{v}_a) \right) d\Omega = \int_{\mathcal{P}_t} \hat{q} d\Omega. \quad (1.23)$$

donde, $\phi[-]$ es la porosidad cinemática del medio, $\rho [\text{ML}^{-3}]$ es la densidad de masa del fluido, $\mathbf{v}_a [\text{LT}^{-1}]$ es la velocidad promedio del fluido y, $\hat{q} [\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}]$ es la razón de flujo de masa de fluido.

Ahora bien, si se aplica a la expresión anterior el Teorema de Localización, en donde por medio de un proceso continuo contraemos $\mathcal{P}_t(\mathbf{x})$ hacia el punto $\mathbf{x} \in \Omega$, se obtiene lo siguiente

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\mathbf{v}_a) = \hat{q} \quad \text{en} \quad \Omega \times (0, T). \quad (1.24)$$

Conjuntando la expresión anterior con la ecuación constitutiva de Darcy, que describe el movimiento de un fluido en un medio poroso a nivel macroscópico por medio del campo de velocidad \mathbf{u} , se llega a establecer el modelo de flujo Darciano en un medio poroso por medio del siguiente sistema de ecuaciones.

$$\left. \begin{aligned} \mu\mathbf{K}^{-1}\mathbf{u} &= -\mathbf{grad} p + \rho\mathbf{g} \\ \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\mathbf{u}) &= \hat{q} \end{aligned} \right\} \quad \text{en} \quad \Omega \times (0, T). \quad (1.25)$$

donde, la velocidad de Darcy \mathbf{u} y la velocidad promedio \mathbf{v}_a estan relacionadas por $\mathbf{u} = \phi\mathbf{v}_a$, y μ es la viscosidad del fluido.

Considerando que la densidad ρ del fluido y la porosidad ϕ del medio son funciones de la presión p , la derivada temporal en el sistema anterior queda expresada como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = \left(\rho \frac{\partial\phi}{\partial p} + \phi \frac{\partial\rho}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (1.26)$$

que expresan la compresibilidad del fluido y del medio poroso en función de p . Entonces, de manera explícita, el modelo de flujo compresible Darciano en un medio poroso queda expresado como

$$\left. \begin{aligned} \mu(\rho\mathbf{K})^{-1}(p)\mathbf{w} &= -\mathbf{grad} p + \rho(p)\mathbf{g}, \\ \left(\rho \frac{\partial\phi}{\partial p} + \phi \frac{\partial\rho}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{w} &= \hat{q}, \end{aligned} \right\} \text{ en } \Omega \times (0, T), \quad (1.27)$$

donde, se ha introducido la razón de flujo de masa $\mathbf{w} = \rho\mathbf{u}$ [ML⁻²T⁻¹].

Por último, se establece la interacción del sistema con su exterior y su estado inicial por medio de una condición de frontera tipo Neumann de flujo de masa normal prescrito \hat{w}_n y una condición de frontera tipo Dirichlet de presión prescrita \hat{p} y la respectiva condición inicial del sistema

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} &= \hat{w}_n, & \text{sobre } \partial\Omega_N \times (0, T), \\ p &= \hat{p}, & \text{sobre } \partial\Omega_D \times (0, T), \\ p(0) &= \hat{p}_0, & \text{en } \Omega. \end{aligned} \right\} \quad (1.28)$$

donde, $\partial\Omega = \partial\Omega_N \cup \partial\Omega_D$.

El sistema de ecuaciones (1.27), conjuntamente con las condiciones de frontera y la condición inicial (1.28), constituyen un *modelo de flujo monofásico mixto dual compresible Darciano*, flujo de masa-presión ($\mathbf{w} - p$) en un medio poroso, en el cual la densidad del fluido ρ y la porosidad del medio ϕ son funciones de la presión p .

1.3 MODELO INCOMPRESIBLE DARCIANO

Ahora bien, considerando que la densidad del fluido ρ y la porosidad del medio ϕ son independientes de la presión p , se obtiene el sistema de ecuaciones

$$\left. \begin{aligned} \mu\mathbf{K}^{-1}(x)\mathbf{u}(x) &= -\mathbf{grad} p(x) + \rho\mathbf{g}, \\ \operatorname{div}\mathbf{u}(x) &= \frac{\hat{q}(x)}{\rho}, \end{aligned} \right\} x \in \Omega, \quad (1.29)$$

que, complementado con sus condiciones de frontera

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} &= \hat{u}_n, & \text{sobre } \partial\Omega_N, \\ p &= \hat{p}, & \text{sobre } \partial\Omega_D. \end{aligned} \right\} \quad (1.30)$$

constituyen el *modelo de flujo monofásico mixto dual incompresible Darciano*, velocidad-presión ($\mathbf{u} - p$) en un medio poroso.

En este caso, solo se necesita especificar la interacción del sistema con su exterior.

1.4 MODELO DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

Continuando con la aplicación de los conceptos básicos a la construcción de modelos físicos, a continuación el problema del transporte de contaminantes. Para ello, se considera como antes una parte material \mathcal{P}_t de un dominio de flujo fijo Ω en un tiempo $t \in (0, T)$, $T > 0$.

Sea c [ML⁻³] la concentración de masa del contaminante en la mezcla. Entonces, la variación temporal de la concentración para cualquier parte \mathcal{P}_t del dominio Ω puede ser expresada como

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \phi c \, d\Omega = \int_{\mathcal{P}_t} \left\{ \frac{\partial(\phi c)}{\partial t} + \text{div}(\phi c \mathbf{u}_a) \right\} d\Omega = \int_{\mathcal{P}_t} \hat{q}(\hat{c} - c) \, d\Omega - \int_{\partial\mathcal{P}_t} \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega \quad (1.31)$$

donde, \hat{c} es la concentración de las fuentes en puntos de inyección, y c es la concentración en puntos de extracción. Los términos $\hat{q}\hat{c} - \hat{q}c$ [ML⁻³T⁻¹] representan las fuentes-sumideros del sistema, \mathbf{s} [ML⁻²T⁻¹] representa el flujo difusivo-dispersivo del contaminante y \mathbf{n} es el vector normal unitario exterior a la frontera de \mathcal{P}_t , $\partial\mathcal{P}_t$.

Entonces, haciendo las siguientes consideraciones: el medio es no-deformable, ϕ constante en el tiempo; la Ley de Darcy es válida para el movimiento de la mezcla $\mathbf{u} = \phi \mathbf{u}_a$; el flujo difusivo-dispersivo del contaminante está expresado por $\mathbf{s} = -\mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{grad} \, c$, aplicando el Teorema de la Divergencia y el Teorema de Localización, en donde por medio de un proceso continuo contraemos $\mathcal{P}_t(\mathbf{x})$ hacia el punto \mathbf{x} , se obtiene

$$\frac{\partial(\phi c)}{\partial t} + \text{div}(c\mathbf{u} - \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{grad} \, c) = \hat{q}(\hat{c} - c), \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \quad (1.32)$$

donde, \mathbf{D} [L²T⁻¹] denota el tensor de difusión-dispersión [5, 6], que depende de la velocidad macroscópica \mathbf{u} .

La ecuación anterior constituye el *modelo de transporte de contaminantes* en el que se puede distinguir una parte advectiva $\text{div}(c\mathbf{u})$, y una parte difusiva $\text{div}(\mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{grad} \, c)$. Para complementar este modelo, se han de especificar sus condiciones de frontera y su condición inicial, de la siguiente manera.

$$c = \hat{c}, \quad \text{sobre } \partial\Omega_D^e \times (0, T), \quad (1.33)$$

$$-\mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{grad} \, c \cdot \mathbf{n} = \hat{w}_n, \quad \text{sobre } \partial\Omega_N^e \times (0, T),$$

$$c(0) = \hat{c}_0, \quad \text{en } \Omega \quad (1.34)$$

Como en los casos anteriores, considerando la frontera del dominio de flujo constituida por sus partes disjuntas Neumann y Dirichlet $\partial\Omega = \partial\Omega_N \cup \partial\Omega_D$.

1.5 MODELO BIFASICO DE FLUJO

Como ultima aplicación de los conceptos básicos a la construcción de modelos físicos y tema central de este trabajo, se presenta el modelo bifásico de flujo inmiscible incompresible en un medio poroso.

Para esto, considerando un dominio Ω y dos fases fluidas que se denotarán por $\alpha = w$ para la fase mojante y $\alpha = n$ para la fase no-mojante, en el intervalo de tiempo $(0, T)$, $T > 0$ sin transferencia de masa entre las fases. Se denotará también por s_α [-] $\alpha = \{w, n\}$, el campo de saturación volumétrica de la fase α , relacionada con el contenido volumétrico de la fase α en términos de la porosidad ϕ por medio de $\phi_\alpha = \phi s_\alpha$. De manera análoga, se denotarán las permeabilidades efectivas de cada fase \mathbf{K}_α [L²] relativas a la permeabilidad intrínseca del medio \mathbf{K} [L²] por $\mathbf{K}_\alpha = k_{r\alpha}(s_\alpha) \mathbf{K}$, siendo $k_{r\alpha}(s_\alpha)$ la permeabilidad relativa de la fase α dependiente

de la saturación de la fase α . Entonces, denotando la velocidad macroscópica de Darcy para la fase α por $\mathbf{u}_\alpha = \phi_\alpha \mathbf{u}_{a\alpha}$, el sistema de ecuaciones que describe el flujo bifásico inmiscible incompresible en un medio poroso se puede expresar para $\alpha = \{w, n\}$ como

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u}_\alpha &= -\frac{k_{r\alpha}(s_\alpha)}{\mu_\alpha} \mathbf{K}(\mathbf{grad} p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}), \\ \frac{\partial(\phi s_\alpha)}{\partial t} + \mathit{div} \mathbf{u}_\alpha &= \hat{q}_\alpha, \end{aligned} \right\} \text{ en } \Omega \times (0, T), \quad (1.35)$$

sujetas a la restricción de saturación total del medio

$$s_w + s_n = 1, \quad (1.36)$$

y complementadas por la relación entre presión acuosa p_w , presión no-acuosa p_n y presión capilar p_c [3, 4].

$$p_c(s) = p_w - p_n. \quad (1.37)$$

La presión capilar desde un punto de vista microscópico para un sistema multifásico, está relacionada con efectos de cohesión y adhesión molecular entre las fases. A nivel macroscópico, estos efectos son expresados por medio de una relación entre la saturación de las fases y la presión capilar [7].

Para que este problema quede completamente determinado, habrá que especificar la interacción del sistema con su medio ambiente y su estado inicial, algo que se hará mas adelante cuando replantee el modelo anterior como dos modelos mixtos acoplados. En este punto resulta conveniente hacer una pequeña discusión acerca del objetivo principal de este trabajo.

En el desarrollo de este trabajo se muestra cómo, de manera sistemática, un problema es llevado desde su planteamiento físico hasta la concreción de su modelo computacional. Con base en este enfoque, se abordará el problema de flujo bifásico inmiscible incompresible en un medio poroso, para llevarlo desde el planteamiento de su modelo físico hasta la obtención de resultados via su modelo computacional.

La metodología a seguir [9], está enfocada a desarrollar los siguientes puntos.

1. Planteamiento del problema.
2. Formulación variacional del problema.
3. Replanteamiento del problema en espacios de dimensión finita.
4. Algoritmos de resolución para los sistemas de ecuaciones lineales o no-lineales resultantes.
5. Construcción del modelo computacional asociado.

Cada uno de estos aspectos se desarrolla en un capítulo por separado en este trabajo, y en cada capítulo se presentan los fundamentos teóricos de cada uno de ellos.

Establecida la metodología que se seguirá y también el problema que se abordará, se desarrolla a continuación el primer punto. Los restantes serán desarrollados paso a paso en los capítulos posteriores.

En el planteamiento del problema de flujo bifásico inmiscible incompresible en un medio poroso, se tienen de manera explícita: dos ecuaciones que describen la velocidad macroscópica de cada fase; dos ecuaciones mas que establecen la conservación de masa para cada fase o la variación temporal local de masa en cada fase; una ecuación para la restricción de saturación total del

medio; y por último, la relación entre presión acuosa p_w , presión no-acuosa p_n y presión capilar p_c . Las correspondientes ecuaciones se presentan a continuación, aclarando que se han hecho algunas hipótesis de trabajo, y se usa la siguiente notación.

$$\begin{array}{lll}
\text{densidad acuosa y no-acuosa} & \rho_w = \text{cte}, & \rho_n = \text{cte}, \\
\text{viscosidad acuosa y no-acuosa} & \mu_w = \text{cte}, & \mu_n = \text{cte}, \\
\text{permeabilidad relativa acuosa y no-acuosa} & k_{rw}(s, x) = k_{rw}(s), & k_{rn}(s, x) = k_{rn}(s), \\
\text{permeabilidad absoluta y saturación acuosa} & \mathbf{K} = \mathbf{K}(x), & s = s_w.
\end{array}$$

Las velocidades de Darcy y ecuaciones de balance de masa para cada fase así como las restricciones complementarias, son las siguientes.

$$\left. \begin{array}{l}
\mathbf{u}_w = -\frac{k_{rw}(s_w)}{\mu_w} \mathbf{K}(\mathbf{grad} p_w - \rho_w \mathbf{g}), \\
\mathbf{u}_n = -\frac{k_{rn}(s_n)}{\mu_n} \mathbf{K}(\mathbf{grad} p_n - \rho_n \mathbf{g}), \\
\frac{\partial(\phi s_w)}{\partial t} + \text{div} \mathbf{u}_w = \hat{q}_w, \\
\frac{\partial(\phi s_n)}{\partial t} + \text{div} \mathbf{u}_n = \hat{q}_n, \\
s_w + s_n = 1, \\
p_c(s_w) = p_w - p_n.
\end{array} \right\} \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (1.38)$$

Considerando que la porosidad del medio no cambia en el tiempo y aplicando la restricción de saturación total del medio, el sistema anterior se puede expresar como

$$\left. \begin{array}{l}
\mathbf{u}_w = -\frac{k_{rw}(s_w)}{\mu_w} \mathbf{K}(\mathbf{grad} p_w - \rho_w \mathbf{g}), \\
\mathbf{u}_n = -\frac{k_{rn}(s_n)}{\mu_n} \mathbf{K}(\mathbf{grad} p_n - \rho_n \mathbf{g}), \\
\phi \frac{\partial s_w}{\partial t} + \text{div} \mathbf{u}_w = \hat{q}_w, \\
-\phi \frac{\partial s_w}{\partial t} + \text{div} \mathbf{u}_n = \hat{q}_n, \\
s_w + s_n = 1, \\
p_c(s_w) = p_w - p_n,
\end{array} \right\} \text{ en } \Omega \times (0, T). \quad (1.39)$$

Para tratar el sistema (1.39), se consideran tres formulaciones fundamentales.

- 1) La formulación velocidad-presión $(\mathbf{u}_w, p_w, \mathbf{u}_n, p_n)$ para cada fase.
- 2) La formulación velocidad-presión acuosa-saturación no-acuosa (\mathbf{u}_w, p_w, s_n) .

3) La formulación velocidad total-presión global-flujo de saturación-saturación $(\mathbf{u}, p, \mathbf{w}, s_w)$.

Para la primera formulación, requerimos la invertibilidad de la función de presión capilar $p_c(s_w)$, esto es, considerando la monotonía de $p_c(s_w)$ [7], invertimos ésta para obtener

$$s_w = p_c^{-1}(p_w - p_n) = g_w(p_w - p_n), \quad (1.40)$$

y de la relación entre las saturaciones

$$s_n = 1 - s_w = 1 - g_w(p_w - p_n) = g_n(p_w - p_n). \quad (1.41)$$

Entonces, con base en las expresiones (1.40) y (1.41), la formulación velocidad-presión para cada fase queda expresada como

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u}_w &= -\frac{k_{rw}(s_w)}{\mu_w} \mathbf{K}(\mathbf{grad} p_w - \rho_w \mathbf{g}), \\ \phi \frac{\partial g_w}{\partial t} + \text{div} \mathbf{u}_w &= \hat{q}_w, \\ \mathbf{u}_n &= -\frac{k_{rn}(s_n)}{\mu_n} \mathbf{K}(\mathbf{grad} p_n - \rho_n \mathbf{g}), \\ \phi \frac{\partial g_n}{\partial t} + \text{div} \mathbf{u}_n &= \hat{q}_n. \end{aligned} \right\} \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (1.42)$$

La segunda formulación se obtiene expresando las ecuaciones para la saturación total y la presión capilar, en la forma

$$s_w = 1 - s_n; \quad p_n = p_w + p_c(1 - s_n), \quad (1.43)$$

y combinandolas con las restantes del sistema (1.39), se obtiene

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u}_w &= -\frac{k_{rw}(1 - s_n)}{\mu_w} \mathbf{K}(\mathbf{grad} p_w - \rho_w \mathbf{g}), \\ \phi \frac{\partial (1 - s_n)}{\partial t} + \text{div} \mathbf{u}_w &= \hat{q}_w, \\ \phi \frac{\partial s_n}{\partial t} - \text{div} \left\{ \frac{k_{sn}}{\mu_n} \mathbf{K}(\mathbf{grad} (p_w - p_c(1 - s_n)) - \rho_n \mathbf{g}) \right\} &= \hat{q}_n, \end{aligned} \right\} \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (1.44)$$

Las formulaciones anteriores (1.44) y (1.42) tienen cada una sus ventajas y desventajas [7]. Sin embargo, en este trabajo deseamos explotar la metodología propuesta en [9], y aprovechar las ventajas que ofrecen los modelos macrohíbridos mixtos [2,15, 21, 26, 27], de una buena aproximación numérica para el campo de velocidades al tratar problemas con alta heterogeneidad y anisotropía en los parámetros físicos, y un tratamiento efectivo para sistemas tridimensionales conformados por diversas formaciones geológicas.

Con base en esto, se desarrolla de manera detallada una última formulación siguiendo el trabajo de Jim Douglas Jr. [8], en donde, el sistema (1.39) se reformula como dos modelos mixtos acoplados velocidad total-presión global-flujo de saturación-saturación $(\mathbf{u}, p, \mathbf{w}, s_w)$.

Para realizar esta última formulación, se hacen las siguientes definiciones.

$$\lambda(s_w) \equiv \frac{k_{rw}(s_w)}{\mu_w} + \frac{k_{rn}(s_w)}{\mu_n}, \quad (1.45)$$

$$\lambda_w(s_w) \equiv \frac{k_{rw}(s_w)}{\lambda(s_w)\mu_w}, \quad (1.46)$$

$$\lambda_n(s_w) \equiv \frac{k_{rn}(s_w)}{\lambda(s_w)\mu_n}. \quad (1.47)$$

Con base en las dos últimas definiciones, se tiene

$$\lambda_w(s_w) + \lambda_n(s_w) = 1. \quad (1.48)$$

Utilizando las definiciones anteriores, el sistema (1.39) queda expresado en la forma

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u}_w &= -\lambda(s_w)\lambda_w(s_w)\mathbf{K}(\mathbf{grad} p_w - \rho_w\mathbf{g}), \\ \mathbf{u}_n &= -\lambda(s_w)\lambda_n(s_w)\mathbf{K}(\mathbf{grad} p_n - \rho_n\mathbf{g}), \\ \phi \frac{\partial s_w}{\partial t} + \text{div} \mathbf{u}_w &= \hat{q}_w, \\ -\phi \frac{\partial s_w}{\partial t} + \text{div} \mathbf{u}_n &= \hat{q}_n, \\ s_w + s_n &= 1, \\ p_c(s_w) &= p_w(s_w) - p_n(s_w), \end{aligned} \right\} \text{ en } \Omega \times (0, T). \quad (1.49)$$

Con el propósito de simplificar la notación, de aquí en adelante se omitirá la dependencia funcional de los campos, y solo se hará explícita cuando se considere conveniente por razones de claridad, en especial, se usará la notación $s = s_w$.

Definiendo la velocidad total \mathbf{u} del sistema como la suma de las velocidades de cada fase

$$\mathbf{u} \equiv \mathbf{u}_w + \mathbf{u}_n, \quad (1.50)$$

y considerando (1.49_{3,4}), $\text{div} \mathbf{u}$ se puede expresar como

$$\text{div} \mathbf{u} = \text{div}(\mathbf{u}_w + \mathbf{u}_n) = \hat{q}_w + \hat{q}_n \equiv \hat{q}. \quad (1.51)$$

Con base en (1.48), la velocidad de la fase acuosa \mathbf{u}_w se puede expresar como

$$\mathbf{u}_w = \lambda_n \mathbf{u}_w - \lambda_w \mathbf{u}_n + \lambda_w (\mathbf{u}_w + \mathbf{u}_n), \quad (1.52)$$

y sustituyendo (1.52) en (1.49₃) se obtiene

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} + \text{div}(\lambda_n \mathbf{u}_w - \lambda_w \mathbf{u}_n) + \text{div}(\lambda_w (\mathbf{u}_w + \mathbf{u}_n)) = \hat{q}_w. \quad (1.53)$$

Ahora bien, desarrollando el término $(\lambda_n \mathbf{u}_w - \lambda_w \mathbf{u}_n)$ y utilizando la relación entre p_c , p_w y p_n , se obtiene

$$\lambda_n \mathbf{u}_w - \lambda_w \mathbf{u}_n = -\mathbf{K} \lambda \lambda_n \lambda_w (\mathbf{grad} p_c - (\rho_w - \rho_n) \mathbf{g}). \quad (1.54)$$

Utilizando (1.54), la ecuación (1.53) queda expresada como

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} - \text{div} \{ \mathbf{K} \lambda \lambda_n \lambda_w (\mathbf{grad} p_c - (\rho_w - \rho_n) \mathbf{g}) \} + \text{div}(\lambda_w \mathbf{u}) = \hat{q}_w. \quad (1.55)$$

Con el propósito de expresar (1.55) en forma mixta, esto es, separar los campos incognita que contiene la ecuación, se hace la siguiente definición

$$D(s) \equiv \lambda(s) \lambda_n(s) \lambda_w(s) p'_c(s) = \frac{k_{rn}(s) k_{rw}(s) p'_c(s)}{k_{rn}(s) \mu_w + k_{rw}(s) \mu_n} \quad (1.56)$$

entonces, la ecuación (1.55) utilizando (1.56), se puede expresar en forma mixta como

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{w} &= -D(s) \mathbf{K} \left(\mathbf{grad} s - \frac{(\rho_w - \rho_n)}{p'_c(s)} \mathbf{g} \right), \\ \phi \frac{\partial s}{\partial t} + \text{div} \mathbf{w} + \text{div}(\lambda_w \mathbf{u}) &= \hat{q}_w, \end{aligned} \right\} \text{ en } \Omega \times (0, T), \quad (1.57)$$

con lo que se tiene el primer modelo mixto (flujo de saturación-saturación) $(\mathbf{w} - s)$ de los dos requeridos.

El segundo de los modelos se obtiene explicitando $\mathbf{u} = \mathbf{u}_w + \mathbf{u}_n$, utilizando para ello las expresiones (1.49_{1,2}) de \mathbf{u}_w y \mathbf{u}_n

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_w + \mathbf{u}_n = -\mathbf{K} \lambda (\lambda_w \mathbf{grad} p_w + \lambda_n \mathbf{grad} p_n - (\lambda_w \rho_w + \lambda_n \rho_n) \mathbf{g}) \quad (1.58)$$

pero el término $(\lambda_w \mathbf{grad} p_w + \lambda_n \mathbf{grad} p_n)$, haciendo uso de la relación entre $(p_c, p_w$ y $p_n)$ se puede expresar de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \lambda_w \mathbf{grad} p_w + \lambda_n \mathbf{grad} p_n &= \frac{1}{2} \{ \mathbf{grad} p_w + \mathbf{grad} p_n + (\lambda_w - \lambda_n) \mathbf{grad} p_c \} \\ &= \mathbf{grad} \left\{ \frac{1}{2} \left(p_w + p_n + \int_0^s (\lambda_w - \lambda_n) \frac{dp_c}{ds} ds \right) \right\}, \end{aligned} \quad (1.59)$$

entonces, definiendo la presión global p , como

$$p(s) = \frac{1}{2} \left(p_w + p_n + \int_0^s (\lambda_w - \lambda_n) \frac{dp_c}{ds} ds \right) \quad (1.60)$$

la velocidad total \mathbf{u} , puede ser expresada como

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_w + \mathbf{u}_n = -\mathbf{K} \lambda (\mathbf{grad} p - (\lambda_w \rho_w + \lambda_n \rho_n) \mathbf{g}). \quad (1.61)$$

La ecuación (1.61) para la velocidad total \mathbf{u} asociada con la ecuación (1.51), constituye el segundo modelo mixto para los campos (velocidad total-presión global) $(\mathbf{u} - p)$,

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u} &= -\mathbf{K} \lambda (\mathbf{grad} p - (\lambda_w \rho_w + \lambda_n \rho_n) \mathbf{g}), \\ \text{div} \mathbf{u} &= \hat{q}, \end{aligned} \right\} \text{ en } \Omega \times (0, T). \quad (1.62)$$

En consecuencia, los dos modelos mixtos acoplados (velocidad total-presión global) y (flujo de saturación-saturación), conforman el modelo mixto bifásico inmiscible incompresible (MB),

$$(MB) \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u} = -\mathbf{K} \lambda (\mathbf{grad} p - (\lambda_w \rho_w + \lambda_n \rho_n) \mathbf{g}), \\ \operatorname{div} \mathbf{u} = \hat{q}, \\ \mathbf{w} = -D(s) \mathbf{K} \left(\mathbf{grad} s - \frac{(\rho_w - \rho_n)}{p'_c(s)} \mathbf{g} \right), \\ \phi \frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{w} + \operatorname{div}(\lambda_w \mathbf{u}) = \hat{q}_w, \end{array} \right\} \quad \text{en } \Omega \times (0, T). \quad (1.63)$$

Para complementar estos modelos, es necesario especificar la interacción con su medio ambiente y su estado inicial. Esto se hace estableciendo las condiciones de frontera,

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} &= \hat{u}_n, & \text{sobre } \partial\Omega_N^p \times (0, T), \\ p &= \hat{p}, & \text{sobre } \partial\Omega_D^p \times (0, T), \\ \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} &= \hat{w}_n, & \text{sobre } \partial\Omega_N^s \times (0, T), \\ s &= \hat{s}, & \text{sobre } \partial\Omega_D^s \times (0, T), \end{aligned} \quad (1.64)$$

y su respectiva condición inicial,

$$s(x, 0) = s_0(x), \quad \text{sobre } \Omega. \quad (1.65)$$

El sistema (1.63, 1.64 y 1.65) constituye un modelo físico para el problema de flujo bifásico en medios porosos, en términos de dos modelos mixtos acoplados (velocidad total-presión global) y (flujo de saturación-saturación). Ahora bien, con el propósito de explotar la potencialidad que tienen los modelos macrohíbridos para tratar discontinuidades en las propiedades físicas de los sistemas, es deseable replantear el modelo anterior en su forma macrohíbrida. Este será el punto a tratar en la siguiente sección.

1.6 MODELO MACROHIBRIDO BIFASICO DE FLUJO

Hasta el momento, se han desarrollado los modelos mixtos que describen el flujo bifásico en un medio poroso Ω . Sin embargo, cuando se considera un medio poroso como el subsuelo, es necesario tomar en cuenta que dicho medio está compuesto por diferentes estratos geológicos con diferentes parámetros físicos, lo que nos conduce de manera natural, a dividir el subsuelo de acuerdo a sus propiedades físicas. Para poder aplicar el modelo bifásico planteado en la sección anterior de manera propia en este tipo de ambientes, resulta útil replantear el modelo en forma local haciendo uso del Método de Descomposición de Dominio. Para replantear el modelo de acuerdo a este enfoque, se adoptará la metodología utilizada en [9].

Sea $\Omega \subset \mathfrak{R}^3$ un dominio espacial fijo, descompuesto en E subdominios en la siguiente forma

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{e=1}^E \bar{\Omega}_e, \quad \Omega_e \cap \Omega_f = \emptyset, \quad 1 \leq e < f \leq E, \quad (1.66)$$

con fronteras internas Γ_e e interfaces Γ_{ef} seccionalmente suaves, expresadas como

$$\begin{aligned}\Gamma_e &= \partial\Omega_e \cap \Omega, \quad 1 \leq e \leq E, \\ \Gamma_{ef} &= \Gamma_e \cap \Gamma_f, \quad 1 \leq e < f \leq E.\end{aligned}\tag{1.67}$$

Entonces, el modelo de flujo bifásico originalmente planteado para un solo dominio Ω , puede expresarse como un conjunto de subproblemas mixtos locales en cada subdominio Ω_e , dando origen a un modelo macrohíbrido mixto bifásico (MHMB), para $e = \{1, 2, \dots, E\}$,

$$\text{(MHMB)} \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_e = -\mathbf{K}_e \lambda_e (\mathbf{grad} p_e - (\lambda_{w,e} \rho_{w,e} + \lambda_{n,e} \rho_{n,e}) \mathbf{g}), \\ \text{div} \mathbf{u}_e = \hat{q}_e, \\ \mathbf{w}_e = -D_e(s) \mathbf{K}_e \left(\mathbf{grad} s_e - \frac{(\rho_{w,e} - \rho_{n,e})}{p'_{c,e}(s)} \mathbf{g} \right), \\ \phi_e \frac{\partial s_e}{\partial t} + \text{div} \mathbf{w}_e + \text{div}(\lambda_{w,e} \mathbf{u}_e) = \hat{q}_{w,e}, \end{array} \right\} \text{ en } \Omega_e \times (0, T), \tag{1.68}$$

en donde, cada subproblema $\{e\}$ está sujeto a cumplir las restricciones de continuidad en los campos velocidad total, presión global, flujo de saturación y saturación a través de las interfaces Γ_{ek} de acuerdo a lo siguiente

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e = -\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k, \\ p_e = p_k, \\ \mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e = -\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{n}_k, \\ s_e = s_k, \end{array} \right\} \text{ a través de } \Gamma_{ek} \times (0, T). \tag{1.69}$$

Como es natural, las condiciones de frontera y la condición inicial de cada subdominio deben replantearse. Las condiciones de frontera en este caso deberán especificarse solo sobre la frontera externa de cada subdominio Ω_e , esto es, para $e = \{1, 2, \dots, E\}$

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e &= \hat{u}_{n,e}, \quad \text{sobre } \partial\Omega_{N,e}^p \times (0, T), \\ p_e &= \hat{p}_e, \quad \text{sobre } \partial\Omega_{D,e}^p \times (0, T), \\ \mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e &= \hat{w}_{n,e}, \quad \text{sobre } \partial\Omega_{N,e}^s \times (0, T), \\ s_e &= \hat{s}_e, \quad \text{sobre } \partial\Omega_{D,e}^s \times (0, T),\end{aligned}\tag{1.70}$$

y la condición inicial para cada subdominio Ω_e queda especificada para $e = \{1, 2, \dots, E\}$ como

$$s_e(x, 0) = s_{0,e}(x) \quad x \in \Omega_e. \tag{1.71}$$

De esta manera se ha construido el modelo macrohíbrido mixto para el problema de flujo bifásico inmisible incompresible en medios porosos, cuya solución se irá desarrollando en los siguientes capítulos.

Como una observación final al planteamiento hecho hasta aquí para el modelo de flujo bifásico, debe notarse que los campos presión, velocidad y saturación de las fases acuosa y no-acuosa $(p_w, \mathbf{u}_w, s_w, p_n, \mathbf{u}_n, s_n)$, están relacionados con los nuevos campos velocidad total, presión global, flujo de saturación y saturación $(\mathbf{u}, p, \mathbf{w}, s)$, por medio de las relaciones.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u}_w &= \lambda_w \mathbf{u} + \mathbf{w}, \\ \mathbf{u}_n &= \lambda_n \mathbf{u} - \mathbf{w}, \\ p_w &= \frac{1}{2} \left(2p + p_c - \int_0^s (\lambda_w - \lambda_n) \frac{dp_c}{ds} ds \right), \\ p_n &= \frac{1}{2} \left(2p - p_c - \int_0^s (\lambda_w - \lambda_n) \frac{dp_c}{ds} ds \right). \end{aligned} \right\} \quad (1.72)$$

El sistema (1.72) permiten recuperar los campos originales $(p_w, \mathbf{u}_w, s_w, p_n, \mathbf{u}_n, s_n)$ del problema de flujo bifásico, una vez obtenidos los nuevos campos $(\mathbf{u}, p, \mathbf{w}, s)$.

Capítulo 2

FORMULACIÓN VARIACIONAL DE PROBLEMAS

INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presentan las bases teóricas que permiten la formulación variacional de un problema de valores a la frontera, siguiendo un enfoque subdiferencial [10, 11]. Como antecedentes a esta metodología, se presenta la formulación variacional fuerte punto a punto, la formulación variacional fuerte global, y la formulación variacional clásica débil para un problema de valores a la frontera. De forma análoga, se presentan las formulaciones variacionales primales, duales, y macrohíbridas mixtas de un problema. Por último, se aplica la teoría para desarrollar la formulación variacional macrohíbrida mixta del problema de flujo bifásico.

2.1 ECUACIONES SUBDIFERENCIALES

Como se indicó en el capítulo anterior, la metodología a seguir para resolver un problema contempla varios puntos. Aquí se desarrolla el segundo de ellos, la formulación variacional de un problema.

Considerando que en todo problema de valores a la frontera, las relaciones que gobiernan los campos en el interior y sobre la frontera de la región donde se encuentra definido el problema, son caracterizables en términos de ecuaciones subdiferenciales [10], y que esto conduce en forma natural a la formulación variacional clásica correspondiente, se puede entender la importancia que tiene este enfoque.

El método general que se utiliza para la formulación variacional de problemas de valores a la frontera, consiste primeramente en caracterizar las condiciones en el interior de la región y sobre la frontera de esta, en términos de ecuaciones subdiferenciales de funcionales convexas.

En general, una funcional convexa real ψ definida sobre los reales \mathfrak{R} , es del tipo

$$\psi : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}, \quad \psi \neq +\infty, \quad (2.1)$$

siendo ψ no necesariamente diferenciable ni continua.

Considerando que ψ es subdiferenciable en un punto $\eta \in \mathfrak{R}$, si existe un real $\eta^* \in \mathfrak{R}$ tal que, la funcional afín $\xi \rightarrow \psi(\eta) + \eta^*(\xi - \eta)$ con pendiente η^* minoriza a la funcional ψ en el punto η , es decir, $\exists \eta^* \in \mathfrak{R}$ tal que

$$\psi(\xi) \geq \psi(\eta) + \eta^*(\xi - \eta) \quad \forall \xi \in \mathfrak{R}. \quad (2.2)$$

Al real η^* se le denomina un subgradiente de ψ en η , y al conjunto (posiblemente vacío) de tales subgradientes se le llama el subdiferencial de ψ en η , y se le denota por

$$\partial\psi(\eta) = \{\eta^* \in \mathfrak{R} : \psi(\xi) \geq \psi(\eta) + \eta^*(\xi - \eta)\}, \quad \forall \xi \in \mathfrak{R}. \quad (2.3)$$

El subdiferencial de ψ , es la transformación multivaluada

$$\partial\psi : \mathfrak{R} \rightarrow 2^{\mathfrak{R}} \quad (2.4)$$

donde, $2^{\mathfrak{R}}$ denota el conjunto potencia de \mathfrak{R} , es decir, la familia de todos los subconjuntos de \mathfrak{R} incluyendo el \emptyset .

Definiendo el dominio efectivo de $\psi : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ como el subconjunto

$$\mathcal{D}(\psi) = \{\xi \in \mathfrak{R} : \psi(\xi) < +\infty\}, \quad (2.5)$$

se observa que ψ es diferenciable en η si, y solo si, el subdiferencial de ψ en η consiste de un solo elemento, la derivada de ψ en η , $\psi'(\eta)$, esto es

$$\partial\psi(\eta) = \{\psi'(\eta)\}. \quad (2.6)$$

Con base en esto, se puede caracterizar de manera general el subdiferencial de ψ en η como el subconjunto

$$\partial\psi(\eta) = \begin{cases} \eta^* \in \mathfrak{R} : \psi(\xi) \geq \psi(\eta) + \eta^*(\xi - \eta) & \forall \xi \in \mathcal{D}(\psi), \\ \emptyset & \forall \xi \notin \mathcal{D}(\psi). \end{cases} \quad (2.7)$$

De esta manera, el concepto subdiferencial, corresponde con una abstracción multivaluada del concepto clásico de diferencial univaluado.

2.2 FORMULACION VARIACIONAL CLASICA

Con el propósito de sistematizar la formulación variacional de un problema utilizando la metodología subdiferencial, se describe a continuación el principio variacional clásico para problemas de valores a la frontera.

Sea Ω un conjunto abierto, acotado y conexo de \mathfrak{R}^n , $n \leq 3$, con frontera $\partial\Omega$, seccionalmente suave. Considerese un problema de valores a la frontera asociado con un campo u y un operador diferencial lineal formal L de tipo elíptico. Entonces la caracterización de este problema en términos subdiferenciales puede expresarse en la forma

$$\begin{aligned} -Lu(x) + f(x) &\in \partial\phi(x; u(x)) & x \in \Omega, \\ -\frac{\partial}{\partial\nu}u(x) &\in \partial\psi(x; u(x)) & x \in \partial\Omega, \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde, $\frac{\partial}{\partial\nu}$ es el operador de frontera Neumann correspondiente al operador L , f es una función dato prescrita en Ω , y $\partial\phi(x; \cdot) : \mathfrak{R} \rightarrow 2^{\mathfrak{R}}, x \in \Omega$ y $\partial\psi(x; \cdot) : \mathfrak{R} \rightarrow 2^{\mathfrak{R}}, x \in \partial\Omega$, son los

subdiferenciales que modelan las restricciones y condiciones impuestas en Ω y sobre su frontera $\partial\Omega$, respectivamente. Considerando además, que los correspondientes subpotenciales $\phi(x; \cdot) : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}, x \in \Omega$ y $\psi(x; \cdot) : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}, x \in \partial\Omega$, son funcionales convexas, semicontínuas inferiormente (s.c.i.) y propias, es decir, no idénticas a $+\infty$. Entonces, de acuerdo con la definición de subdiferencial, el problema anterior se puede expresar como

$$\left. \begin{aligned} &u(x) \in \mathcal{D}(\phi(x; \cdot)) : \\ &Lu(x) \cdot \{v(x) - u(x)\} + \phi(x; v(x)) - \phi(x; u(x)) \geq f(x)\{v(x) - u(x)\}, \\ &\forall v(x) \in \mathcal{D}(\phi(x; \cdot)), \quad x \in \Omega, \end{aligned} \right\} \quad (2.9)$$

$$\left. \begin{aligned} &u(x) \in \mathcal{D}(\psi(x; \cdot)) : \\ &\psi(x; v(x)) - \psi(x; u(x)) \geq -\frac{\partial}{\partial v}u(x)\{v(x) - u(x)\}, \\ &\forall v(x) \in \mathcal{D}(\psi(x; \cdot)), \quad x \in \partial\Omega. \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

El problema constituido por (2.9-2.10) representa la formulación variacional fuerte punto a punto del problema (2.8).

Como siguiente paso intermedio para obtener la formulación variacional clásica, se obtiene la formulación variacional fuerte global. Para esto, considerando el orden del operador diferencial elíptico L , es necesario identificar un espacio de Hilbert $V(\Omega)$, el cual esté denso y continuamente embebido en el espacio $L^2(\Omega)$.

El dual de $V(\Omega)$ es el espacio $V'(\Omega) = \mathcal{L}(V(\Omega), \mathfrak{R})$, con $V(\Omega) \subset L^2(\Omega) \subset V'(\Omega)$. Entonces, con base en las definiciones

$$V_P(\Omega) = \{v \in V(\Omega) : Lv \in L^2(\Omega)\}, \quad (2.11)$$

$$\langle Pu, v \rangle = \int_{\Omega} Lu v \, d\Omega, \quad u \in V_P(\Omega), \quad v \in V(\Omega), \quad (2.12)$$

$$\mathcal{D}(\Phi) = \{v \in V(\Omega) : \phi(\cdot; v(\cdot)) \in L^1(\Omega)\}, \quad (2.13)$$

$$\Phi(v) = \begin{cases} \int_{\Omega} \phi(x; v) \, d\Omega, & v \in \mathcal{D}(\Phi), \\ +\infty, & v \notin \mathcal{D}(\Phi), \end{cases} \quad (2.14)$$

$$\langle f, v \rangle = \int_{\Omega} f v \, d\Omega, \quad f \in L^2(\Omega), \quad v \in V(\Omega), \quad (2.15)$$

de la desigualdad (2.9) en Ω , se obtiene la expresión variacional

$$u \in V_P(\Omega) \cap \mathcal{D}(\Phi) : \langle Pu, v - u \rangle + \Phi(v) - \Phi(u) \geq \langle f, v - u \rangle, \quad \forall v \in \mathcal{D}(\Phi). \quad (2.16)$$

Observese que $P \in \mathcal{L}(V_P(\Omega), L^2(\Omega))$, $\Phi : V(\Omega) \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ es una funcional convexa con dominio efectivo $\mathcal{D}(\Phi)$, y $f \in V'(\Omega)$.

Por otro lado, sea

$$\gamma \in \mathcal{L}(V(\Omega), B(\partial\Omega)), \quad (2.17)$$

el operador traza correspondiente al espacio $V(\Omega)$, es decir, el operador lineal y continuo que asigna valores sobre la frontera de tipo Dirichlet, cuyo rango $B(\partial\Omega)$ es un espacio de Banach denso y continuamente embebido en $L^2(\Omega)$, y cuyo núcleo $V_0(\Omega) = \{v \in V(\Omega) : \gamma v = 0\}$ es un subespacio cerrado y denso de $L^2(\Omega)$. A este operador se le llama el operador de frontera Dirichlet correspondiente al operador formal P , y al operador

$$\delta \in \mathcal{L}(V_P(\Omega), B'(\partial\Omega)), \quad (2.18)$$

definido por la expresión,

$$[\delta u, \gamma v] = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \nu} \gamma v \, d\partial\Omega, \quad u \in V_P(\Omega), \quad v \in V(\Omega), \quad (2.19)$$

el correspondiente operador de frontera Neumann.

Entonces, de manera similar a lo que se hizo para la desigualdad (2.9), de la desigualdad (2.10) sobre $\partial\Omega$, bajo la definición de la funcional convexa $\psi \circ \gamma : V(\Omega) \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$,

$$\Psi(\gamma v) = \begin{cases} \int_{\partial\Omega} \psi(x; \gamma v) \, d\partial\Omega, & v \in \mathcal{D}(\Psi \circ \gamma), \\ +\infty & v \notin \mathcal{D}(\Psi \circ \gamma), \end{cases} \quad (2.20)$$

con dominio efectivo

$$\mathcal{D}(\Psi \circ \gamma) = \{v \in V(\Omega) : \psi(\cdot; \gamma v(\cdot)) \in L^1(\partial\Omega)\}, \quad (2.21)$$

se obtiene la desigualdad de frontera global,

$$u \in V_P(\Omega) \cap \mathcal{D}(\Psi \circ \gamma) : \Psi(\gamma v) - \Psi(\gamma u) \geq -[\delta u, \gamma v - \gamma u], \quad \forall v \in \mathcal{D}(\Psi \circ \gamma). \quad (2.22)$$

Entonces, combinando las desigualdades (2.16) y (2.22), la formulación variacional fuerte global del problema (2.8) está dada por

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } f \in L^2(\Omega), \text{ encuentre } u \in V_P(\Omega) \cap K : \\ \langle Pu, v - u \rangle + \Phi(v) - \Phi(u) + \Psi(\gamma v) - \Psi(\gamma u) \geq \\ \langle f, v - u \rangle - [\delta u, \gamma v - \gamma u], \end{array} \right. \quad \forall v \in K, \quad (2.23)$$

donde K , el conjunto convexo de campos admisibles, está definido por

$$K = \{v : v \in \mathcal{D}(\Phi) \cap \mathcal{D}(\Psi \circ \gamma)\}. \quad (2.24)$$

Partiendo de esto y aplicando la primera fórmula de Green al operador formal P , se tiene que

$$a(u, v) = \langle Pu, v \rangle + [\delta u, \gamma v], \quad u \in V_P(\Omega), \quad v \in V(\Omega), \quad (2.25)$$

entonces, haciendo uso de (2.23) y (2.25), la formulación variacional clásica (débil) del problema (2.8), se puede expresar como

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } f \in V'(\Omega), \text{ encuentre } u \in K : \\ a(u, v - u) + \Phi(v) - \Phi(u) + \Psi(\gamma v) - \Psi(\gamma u) \geq \langle f, v - u \rangle, \quad \forall v \in K. \end{array} \right. \quad (2.26)$$

Dado que en (2.26) la función dato $f \in V'(\Omega) \supset L^2(\Omega)$, y la solución u es buscada en el convexo $K \supset V_P(\Omega) \cap K$, ésta se considera una formulación variacional débil del problema, a diferencia de la formulación variacional fuerte (2.23).

El problema variacional (2.26) es un problema bien planteado, es decir, posee solución única que depende continuamente de los datos, si se cumplen las siguientes condiciones.

(C1) K es un subconjunto no vacío, convexo y cerrado de $V(\Omega)$.

(C2) $a : V(\Omega) \times V(\Omega) \rightarrow \mathfrak{R}$ es una forma bilineal, continua y K -elíptica, es decir,
 $\exists \alpha > 0$ tal que $a(u - v, u - v) \geq \alpha \|u - v\|_{V(\Omega)}^2$, $\forall u, v \in K$.

(C3) $\Phi : V(\Omega) \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ y $\Psi \circ \gamma : V(\Omega) \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ son funcionales convexas y semicontínuas inferiormente y propias.

Bajo las condiciones anteriores (C1-C3), suponiendo que la forma bilineal $a : V(\Omega) \times V(\Omega) \rightarrow \mathfrak{R}$ es simétrica, es decir

(C4) $a(u, v) = a(v, u)$, $\forall u, v \in V(\Omega)$,

el problema variacional (2.26) es equivalente al problema de optimización,

$$\begin{cases} \text{Encuentre } u \in K : \\ J(u) \leq J(v), \quad \forall v \in K, \end{cases} \quad (2.27)$$

donde, $J : V(\Omega) \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ es la funcional definida por

$$J(v) = \frac{1}{2}a(v, v) + \Phi(v) + \Psi(\gamma v) - \langle f, v \rangle, \quad \forall v \in V(\Omega). \quad (2.28)$$

La importancia de la formulación variacional clásica de un problema es que, a partir de ella, la teoría variacional de ecuaciones diferenciales parciales permite determinar condiciones de existencia, unicidad y dependencia continua de los datos respecto de las soluciones. Así mismo, permite estudiar bajo qué condiciones de regularidad, las soluciones débiles son necesariamente soluciones fuertes, y estas, soluciones clásicas del problema en cuestión [33, 34, 35].

Otras ventajas que presenta este enfoque es que, a partir de la formulación variacional clásica, se pueden derivar formulaciones variacionales alternativas para un problema, siendo algunas muy importantes analizadas en [14]. Además, la formulación variacional clásica o sus versiones alternativas, permiten generar algunos de los esquemas numéricos abstractos más poderosos en la aproximación de soluciones, los cuales son construidos a través de técnicas tipo Galerkin, diferencias finitas y elementos finitos [36, 37].

En el caso de problemas de valor a la frontera potenciales, esto es, problemas variacionales caracterizables en términos de un problema de minimización, se ha estudiado como las formulaciones variacionales son producidas de manera sistemática por medio de la teoría de Dualidad Perturbación [38]. De hecho, este método puede ser entendido como un método directo aplicable incluso a problemas no potenciales [12].

El método puede ser descrito de la siguiente manera. Dado un problema de valores a la frontera no necesariamente potencial, con interior convexo y condiciones de frontera y restricciones, primeramente es expresado en términos de ecuaciones subdiferenciales que corresponden a su

formulación variacional primal local. Entonces, la dualización de las condiciones de frontera y restricciones se realiza via la correspondiente gráfica inversa de las ecuaciones subdiferenciales, obteniéndose la formulación variacional local dual del problema. Combinando las ecuaciones subdiferenciales primal y dual, se construyen las formulaciones variacionales globales. Esto es, una vez que las ecuaciones subdiferenciales locales son expresadas como desigualdades variacionales locales en términos de sus subpotenciales, la integración directa y la aplicación de la fórmula de Green producen la formulación variacional global deseada con la introducción de los correspondientes campos duales e intermedios.

Lo expuesto hasta aquí, puede sintetizarse de la siguiente manera. En la formulación matemática de un problema de valores a la frontera con restricciones, las relaciones que gobiernan el "flujo" del campo en estudio, tanto en el interior como sobre la frontera de la región en cuestión, constituyen la información de partida. Estas relaciones son modelables de manera natural en términos de ecuaciones subdiferenciales. Este es el concepto fundamental en la modelación de la matemática actual; el subdiferencial, una abstracción multivaluada del concepto clásico de diferencial univaludo.

Así, en términos generales, el modelo matemático de todo problema de valores a la frontera, toma la forma

$$\begin{aligned} u(x) \in \mathcal{D}(\phi(x; \cdot)) : -Lu(x) + f(x) \in \partial\phi(x; u(x)) \quad x \in \Omega, \\ \gamma u(x) \in \mathcal{D}(\psi(x; \cdot)) : -\frac{\partial}{\partial\nu}u(x) \in \partial\psi(x; \gamma u(x)) \quad x \in \partial\Omega, \end{aligned}$$

donde, los dominios efectivos $\mathcal{D}(\phi(x; \cdot))$ y $\mathcal{D}(\psi(x; \cdot))$ de los subpotenciales modelan las condiciones y restricciones del campo en estudio, y los subdiferenciales correspondientes $\partial\phi(x; \cdot)$ y $\partial\psi(x; \cdot)$, modelan las relaciones gobernantes del "flujo" del campo en el interior y sobre la frontera, respectivamente.

De este modo, partiendo de la formulación variacional local del problema, mediante integración y la aplicación de la fórmula de Green, se obtiene la formulación variacional global clásica del problema, tomando la forma abstracta

$$\begin{cases} \text{Dado } f \in V'(\Omega), \text{ encuentre } u \in K = \mathcal{D}(\Phi) \cap \mathcal{D}(\Psi \circ \gamma) : \\ a(u, v - u) + \Phi(v) - \Phi(u) + \Psi(\gamma v) - \Psi(\gamma u) \geq \langle f, v - u \rangle, \quad \forall v \in K. \end{cases}$$

Este es el problema variacional, base del análisis variacional, a partir del cual se realiza el análisis cualitativo de existencia, unicidad y dependencia continua respecto a los datos. Además, como punto fundamental de este enfoque, este es el origen de toda formulación variacional alternativa del problema para otras interpretaciones de él, y el desarrollo de algunos de los mas importantes esquemas numéricos de aproximación. De hecho, a través de los conceptos de aproximaciones abstractas externas e internas, es donde las técnicas de Galerkin, diferencias finitas y elementos finitos quedan matemáticamente fundamentadas.

2.3 FORMULACIONES VARIACIONALES PRIMAL Y DUAL

El propósito de esta sección es mostrar como se dualizan las condiciones y restricciones de un problema via la gráfica inversa de las ecuaciones subdiferenciales correspondientes, con el propósito de generar las formulaciones variacionales primales y duales de dicho problema [11].

El concepto fundamental relacionado con esto es el de una función conjugada. Considérese una función $f : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ y su función conjugada definida por

$$f^* : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}, \quad f^*(\xi^*) = \sup\{\xi^*\xi - f(\xi); \quad \xi \in \mathfrak{R}\}, \quad (2.29)$$

la cual es una función convexa con dominio efectivo $\mathcal{D}(f^*)$, no vacío y cerrado. El siguiente resultado de análisis convexo será la base para la dualización [38].

Lemma 2.1. Sea $f : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ una función convexa, con dominio efectivo $\mathcal{D}(f) \neq \emptyset$ y cerrado, entonces

$$\eta \in \mathcal{D}(f) : \eta^* \in \partial f(\eta) \Leftrightarrow \eta^* \in \mathcal{D}(f^*) : \eta \in \partial f^*(\eta^*), \quad (2.30)$$

donde, $f^* : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ es la función conjugada de f , esto es, la gráfica inversa del subdiferencial de f , ∂f , es la gráfica del subdiferencial de f^* , ∂f^* .

Consecuentemente, una ecuación subdiferencial primal está caracterizada por su ecuación subdiferencial dual. Nótese que, de acuerdo con la definición de subdiferencial, las ecuaciones (2.30) tienen la siguiente interpretación

$$\eta \in \mathcal{D}(f) : f(\xi) - f(\eta) \geq \eta^*(\xi - \eta) \quad \forall \xi \in \mathcal{D}(f), \quad (2.31)$$

$$\eta^* \in \mathcal{D}(f^*) : f^*(\xi^*) - f^*(\eta^*) \geq \eta(\xi^* - \eta^*) \quad \forall \xi^* \in \mathcal{D}(f^*),$$

las cuales son las correspondientes desigualdades variacionales en términos de los subpotenciales f y f^* . Estos conceptos serán usados para construir las formulaciones variacionales primales y duales de problemas de valores a la frontera.

Siguiendo el trabajo de Alduncin 1987, [12], los problemas de valor a la frontera no lineales con restricciones, definidos sobre un dominio $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega \subset \mathfrak{R}^n$, $n \geq 1$, pueden ser expresados en términos de ecuaciones subdiferenciales locales de la siguiente forma

$$\begin{aligned} u(x) \in \mathcal{D}(\phi(x; \cdot)) : -Pu(x) + f(x) \in \partial\phi(x; u(x)) \quad x \in \Omega, \\ \gamma u(x) \in \mathcal{D}(\psi(x; \cdot)) : -\frac{\partial}{\partial\nu}u(x) \in \partial\psi(x; \gamma u(x)) \quad x \in \partial\Omega, \end{aligned} \quad (2.32)$$

donde, P es un operador elíptico formal, con operadores de frontera Dirichlet γ , y Neumann $\frac{\partial}{\partial\nu}$, f una función dato interior, y $\partial\phi(x; \cdot) : \mathfrak{R}^l \rightarrow 2^{\mathfrak{R}^l}$ y $\partial\psi(x; \cdot) : \mathfrak{R}^m \rightarrow 2^{\mathfrak{R}^m}$, $l, m \geq 1$, son los subdiferenciales locales que modelan restricciones en el interior y condiciones de frontera del problema. Además, para cada $x \in \Omega$ y $x \in \partial\Omega$, los correspondientes subpotenciales $\phi(x; \cdot) : \mathfrak{R}^l \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ y $\psi(x; \cdot) : \mathfrak{R}^m \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$, son funciones convexas con dominio efectivo $\mathcal{D}(\phi(x; \cdot)) \subset \mathfrak{R}^l$ y $\mathcal{D}(\psi(x; \cdot)) \subset \mathfrak{R}^m$ no vacío y cerrado.

El modelo matemático (2.32) corresponde a la formulación variacional primal local del problema (2.8), el cual, de acuerdo con la definición de subdiferencial, está caracterizado por las desigualdades variacionales locales

$$\begin{cases} u(x) \in \mathcal{D}(\phi(x; \cdot)) : \\ Pu(x) \cdot \{v(x) - u(x)\} + \phi(x; v(x)) - \phi(x; u(x)) \geq \\ f(x)\{v(x) - u(x)\}, \quad \forall v(x) \in \mathcal{D}(\phi(x; \cdot)), \quad x \in \Omega, \end{cases} \quad (2.33)$$

$$\begin{cases} \gamma u(x) \in \mathcal{D}(\psi(x; \cdot)) : \psi(\gamma v(x)) - \psi(\gamma u(x)) \geq \\ -\frac{\partial}{\partial \nu} u(x) \{\gamma v(x) - \gamma u(x)\}, \quad \forall \gamma v(x) \in \mathcal{D}(\psi(x; \cdot)), \quad x \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (2.34)$$

Con base en la formulación variacional primal local, integrando sobre Ω y aplicando la correspondiente fórmula de Green, se tiene

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} P(u) \cdot v \, d\Omega &= \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \nu} \cdot \gamma v \, d\partial\Omega \\ &= a(u, v) - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \nu} \cdot \gamma v \, d\partial\Omega, \quad u \in V_P, \end{aligned} \quad (2.35)$$

donde, $V_P = \{v \in V(\Omega)^l : P(v) \in L^2(\Omega)^l\}$ es en general, un espacio de Banach densa y continuamente embebido en $L^2(\Omega)$.

Utilizando (2.35), la formulación variacional primal global del problema (2.32) queda expresada como

$$\begin{cases} \text{Dado } f \in L^2(\Omega)^l, \text{ encuentre } u \in K : \\ a(u, v - u) + \int_{\Omega} \phi(x; v) \, d\Omega - \int_{\Omega} \phi(x; u) \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} \psi(x; \gamma v) \, d\partial\Omega \\ - \int_{\partial\Omega} \psi(x; \gamma u) \, d\partial\Omega \geq \int_{\Omega} f \cdot \{v - u\} \, d\Omega, \quad \forall v \in K, \end{cases} \quad (2.36)$$

donde,

$$K = \{v \in V(\Omega)^l : \phi(\cdot; v(\cdot)) \in L^1(\Omega), \psi(\cdot; \gamma v(\cdot)) \in L^1(\Omega)\}, \quad (2.37)$$

es el conjunto de campos primales admisibles.

Este método puede utilizarse de manera sistemática para caracterizar los subdiferenciales monótonos locales en términos de sus gráficas inversas, las cuales corresponden a los subdiferenciales de los subpotenciales conjugados respectivos. Esto es, se dualiza sobre la base del lemma 2.1.

Por ejemplo, la dualización completa del problema (2.32), se hace de la siguiente forma

$$-Pu(x) + f(x) \in \mathcal{D}(\phi^*(x; \cdot)) : u(x) \in \partial\phi^*(x; -Pu(x) + f(x)), \quad x \in \Omega, \quad (2.38)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \nu} u(x) \in \mathcal{D}(\psi^*(x; \cdot)) : \gamma u(x) \in \partial\psi^*(x; -\frac{\partial}{\partial \nu} u(x)) \quad x \in \partial\Omega. \quad (2.39)$$

Esta es la formulación variacional dual local del problema, cuya expresión en términos de desigualdades variacionales está dada por

$$\begin{aligned} -Pu(x) + f(x) \in \mathcal{D}(\phi^*(x; \cdot)) : \phi^*(x; -Pv(x) + f(x)) - \phi^*(x; Pu(x) + f(x)) \\ \geq u(x) \{-Pv(x) + Pu(x)\} \quad \forall \quad -Pu(x) + f(x) \in \mathcal{D}(\phi^*(x; \cdot)), \quad x \in \Omega, \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial \nu} u(x) \in \mathcal{D}(\psi^*(x; \cdot)) : \psi^* \left(x; -\frac{\partial}{\partial \nu} v(x) \right) - \psi^* \left(x; -\frac{\partial}{\partial \nu} u(x) \right) \\
& \geq \gamma u(x) \left(-\frac{\partial}{\partial \nu} v(x) + \frac{\partial}{\partial \nu} u(x) \right) \quad \forall \quad -\frac{\partial}{\partial \nu} v(x) \in \mathcal{D}(\psi^*(x; \cdot)), \quad x \in \partial\Omega,
\end{aligned} \tag{2.41}$$

entonces, integrando sobre Ω y aplicando la fórmula de Green se llega directamente a la formulación variacional dual global del problema

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } u \in K^* : \\ a(v, u) - a(u, u) + \int_{\Omega} \phi^*(x; -P(v) + f) d\Omega - \int_{\Omega} \phi^*(x; -P(u) + f) d\Omega \\ + \int_{\partial\Omega} \psi^* \left(x; -\frac{\partial}{\partial \nu}(v) \right) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega} \psi^* \left(x; -\frac{\partial}{\partial \nu}(u) \right) d\partial\Omega \geq 0 \quad \forall v \in K^*, \end{array} \right. \tag{2.42}$$

donde,

$$K^* = \left\{ v \in V_P : \phi^*(\cdot; -P(v)(\cdot) + f(\cdot)) \in L^1(\Omega) \right\}, \quad \psi^* \left(\cdot; -\frac{\partial}{\partial \nu} v(\cdot) \right) \in L^1(\partial\Omega), \tag{2.43}$$

es el conjunto de campos duales admisibles.

2.4 FORMULACION VARIACIONAL MACROHÍBRIDA MIXTA

Se presenta a continuación una forma de construir la formulacion variacional macrohíbrida mixta de problemas de valores a la frontera, considerando un problema global mixto abstracto, definido en un dominio espacial $\Omega \subset \mathfrak{R}^3$, acotado y con frontera regular $\partial\Omega$.

Sean $V(\Omega)$ y $Y(\Omega)$ dos espacios de Banach reflexivos reales con espacios duales denotados por $V^*(\Omega)$ y $Y^*(\Omega)$. Sea $\mathcal{A} : V(\Omega) \rightarrow 2^{V^*(\Omega)}$ un operador variacional monótono maximal y, $\Lambda \in \mathcal{L}(V(\Omega), Y(\Omega))$ un operador lineal y contínuo con transpuesto $\Lambda^T \in \mathcal{L}(Y^*(\Omega), V^*(\Omega))$, y $G : Y(\Omega) \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ un funcional convexo semicontínuo inferiormente y propio, con $G^* : Y^*(\Omega) \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ su conjugado. Entonces, como un problema mixto general se considera el siguiente

$$\text{(M)} \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (u, p^*) \in V \times Y^* : \\ -\Lambda^T p^* \in \mathcal{A}(u), \\ \Lambda u \in \partial G^*(p^*), \end{array} \right. \tag{2.44}$$

donde, $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \{v \in V(\Omega) : \mathcal{A}(v) \neq \emptyset\}$ es el dominio de \mathcal{A} , que en general es un operador multivaluado, $\mathcal{D}(G^*) = \{q^* \in Y^*(\Omega) : G^*(q^*) < +\infty\}$ es el dominio efectivo de G^* , y $\partial G^* : Y^*(\Omega) \rightarrow 2^{Y^*(\Omega)}$ es el subdiferencial de G^* , un operador monótono maximal.

Considerando que, para el análisis de existencia y unicidad del problema (2.44) fuese necesario trabajar con los problemas primal y dual, se asocia al problema mixto (M) el siguiente problema primal (P)

$$(P) \begin{cases} \text{Encuentre } u \in V : \\ 0 \in \mathcal{A}(u) + \partial(G \circ \Lambda)(u). \end{cases} \quad (2.45)$$

Esta asociación del problema (P) al problema (M), se hace considerando que se cumple la condición de sobreyectividad del operador Λ [39],

$$\Lambda \in \mathcal{L}(V, Y) \quad \text{es sobreyectiva} \quad (2.46)$$

lo cual implica que

$$\partial(G \circ \Lambda) = \Lambda^T \circ \partial G \circ \Lambda \quad (2.47)$$

La condición (2.46), usada para asociar el problema (P) al problema (M), es una generalización de la sugerida por Ekeland-Temam [38].

El problema dual asociado al problema mixto (M) es el siguiente

$$(D) \begin{cases} \text{Encuentre } p^* \in Y^* : \\ 0 \in \partial(G^*)(p^*) + \partial(\mathcal{A}^{-1} \circ (-\Lambda^T))(p^*), \end{cases} \quad (2.48)$$

donde, para asociar (D) a (M), se ha utilizado la condición [39],

$$\Lambda^T \in \mathcal{L}(Y^*, V^*) \quad \text{es sobreyectiva.} \quad (2.49)$$

Las soluciones del problema mixto (M), y las del primal (P) y el dual (D), están relacionados de la siguiente manera [13, 39].

i) Si (u, p^*) es solución del problema mixto (M), entonces, u es solución del problema primal (P) y p^* es solución del problema dual (D).

ii) Si u es una solución del problema primal (P), entonces, $\exists p^* \in \mathcal{D}(G^*)$ tal que, $p^* \in \partial G(u)$ y (u, p^*) es una solución del problema mixto (M).

iii) Si p^* es una solución del problema dual (D), entonces, $\exists u \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ tal que, $-\Lambda u \in \partial(\mathcal{A}^{-1} \circ (-\Lambda^T))(p^*)$ es una solución del problema mixto (M).

Considerando las ventajas que tienen las formulaciones variacionales macrohíbridas mixtas de un problema y, tomando en cuenta que el modelo bifásico, tema central de este trabajo, es un sistema constituido de dos modelos mixtos acoplados, a continuación se desarrollan estas formulaciones para su aplicación a tal problema en la siguiente sección.

En lo que sigue, se replantea el problema mixto (M) en su forma macrohíbrida, usando para ello el método de descomposición de dominio sin traslape, con condiciones de transmisión de interfase dualizadas y modeladas subdiferencialmente.

Para la descomposición espacial de un dominio Ω en términos de sus subdominios disjuntos Ω_e , se tiene lo siguiente.

Sea Ω un dominio espacial descompuesto en términos de subdominios asociados y disjuntos de la siguiente forma

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{e=1}^E \overline{\Omega}_e, \quad \Omega_e \cap \Omega_f = \emptyset, \quad 1 \leq e < f \leq E, \quad (2.50)$$

con fronteras internas e interfaces definidas por,

$$\Gamma_e = \partial\Omega_e \cap \Omega, \quad 1 \leq e \leq E, \quad (2.51)$$

$$\Gamma_{ef} = \Gamma_e \cap \Gamma_f, \quad 1 \leq e < f \leq E. \quad (2.52)$$

Considerando los operadores \mathcal{A} , Λ y ∂G^* primales y duales en forma local, esto es, para $e = 1, 2, \dots, E$, sean $V(\Omega_e)$ los correspondientes espacios de Banach reflexivos primales locales, continua y densamente embebido en un espacio pivote de Hilbert $H(\Omega_e)$, y sean $B(\Gamma_e)$ y $B^*(\Gamma_e)$, los respectivos espacios de frontera interna Dirichlet y Neumann, con los operadores traza Dirichlet y Neumann $\gamma_e \in \mathcal{L}(V(\Omega_e), B(\Gamma_e))$ y $\delta_e : V(\Omega_e) \rightarrow B^*(\Gamma_e)$ respectivamente. También, sean $\gamma_e^T \in \mathcal{L}(B^*(\Gamma_e), V^*(\Omega_e))$ los transpuestos de los operadores Dirichlet locales, y $Y^*(\Omega_e)$ los espacios de Banach reflexivos locales de los campos duales.

Entonces, la reformulación del problema (M) de manera local, para $e = \{1, 2, \dots, E\}$, está dada por

$$(MH) \begin{cases} \text{Encuentre } (u_e, p_e^*) \in V(\Omega_e) \times Y^*(\Omega_e) : \\ -\Lambda_e^T p_e^* + \gamma_e^T \delta_e(u_e) \in \mathcal{A}_e(u_e), \\ \Lambda_e u_e \in \partial G_e^*(p_e^*) \end{cases} \quad (2.53)$$

donde, la continuidad de las condiciones de transmisión a través de las interfaces Γ_{ef} para el campo primal descompuesto $\{u_e\} \in \prod_{e=1}^E V(\Omega_e)$ están dadas por

$$\{\gamma_e u_e\} \in Q_D = \left\{ \{q_e\} \in \prod_{e=1}^E B(\Gamma_e) : q_e = q_f \text{ sobre } \Gamma_{ef}, \quad 1 \leq e < f \leq E \right\}, \quad (2.54)$$

$$-\{\delta_e(u_e)\} \in Q_N^* = \left\{ \{q_e^*\} \in \prod_{e=1}^E B^*(\Gamma_e) : q_e^* = -q_f^* \text{ sobre } \Gamma_{ef}, \quad 1 \leq e < f \leq E \right\}. \quad (2.55)$$

siendo Q_D y Q_N^* los subespacios admisibles de transmisión.

Ahora bien, para incorporar las restricciones (2.54) y (2.55) a los problemas mixtos localizados (2.53) en forma variacional, se aplica la metodología subdiferencial expresada en el siguiente

Lemma 2.2 Las restricciones de transmisión (2.54) y (2.55) están caracterizadas variacionalmente por sus ecuaciones subdiferenciales monótonas primal y dual

$$-\{\delta_e(u_e)\} \in \partial I_{Q_D}(\{\gamma_e u_e\}) \Leftrightarrow \{\gamma_e u_e\} \in \partial I_{Q_N^*}(-\{\delta_e(u_e)\}) \quad (2.56)$$

donde, I_{Q_D} e $I_{Q_N^*}$, denotan las funcionales indicatrices de los subespacios admisibles de transmisión Dirichlet y Neumann Q_D y Q_N^* de (2.54) y (2.55) respectivamente.

De la estructura lineal de los subespacios Q_D y Q_N^* , se tiene que

$$\begin{aligned} \partial I_{Q_D}(\{q_e\}) &= \left\{ \{q_e^*\} \in \prod_{e=1}^E B^*(\Gamma_e) : \sum_{e=1}^E [q_e^*, s_e]_{B(\Gamma_e)} = 0 \quad \forall \{s_e\} \in Q_D \right\} \\ &\equiv Q_D^\perp, \quad \forall \{q_e\} \in Q_D, \end{aligned} \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \partial I_{Q_N^*}(\{q_e^*\}) &= \left\{ \{q_e\} \in \prod_{e=1}^E B(\Gamma_e) : \sum_{e=1}^E [s_e^*, q_e]_{B(\Gamma_e)} = 0 \quad \forall \{s_e^*\} \in Q_N^* \right\} \\ &\equiv Q_N^{*\perp}, \quad \forall \{q_e^*\} \in Q_N^*. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Además, considerando que se cumplen las relaciones

$$Q_D^\perp = Q_N^* \quad y \quad Q_N^{*\perp} = Q_D, \quad (2.59)$$

sea $q^* \in Q_N^*$, entonces, $\forall s \in Q_D$, con base en (2.57) y (2.58) se tiene que

$$\begin{aligned} \sum_{e=1}^E [q_e^*, s_e]_{B(\Gamma_{ef})} &= \sum_{1 \leq e < f \leq E} [q_e^*, s_e]_{B(\Gamma_{ef})} + [q_f^*, s_f]_{B(\Gamma_{ef})} \\ &= \sum_{1 \leq e < f \leq E} [q_e^*, s_e]_{B(\Gamma_{ef})} - [q_e^*, s_e]_{B(\Gamma_{ef})} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.60)$$

donde, $B(\Gamma_{ef}) = B(\Gamma_e)|_{\Gamma_{ef}} = B(\Gamma_f)|_{\Gamma_{ef}}$. En consecuencia, $Q_N^* \subset Q_D^\perp$. De manera similar, encontramos que $Q_D \subset Q_N^{*\perp}$. Recíprocamente, sea $q^* \in Q_D^\perp$, entonces, se encuentra que, $\forall s \in Q_D$

$$\sum_{e=1}^E [q_e^*, s_e]_{B(\Gamma_{ef})} = 0 = \sum_{1 \leq e < f \leq E} [q_e^*, s_e]_{B(\Gamma_{ef})} + [q_f^*, s_e]_{B(\Gamma_{ef})}. \quad (2.61)$$

esto es, $Q_D^\perp \subset Q_N^*$; y similarmente, $Q_N^{*\perp} \subset Q_D$. Por lo tanto, (2.57)-(2.61) nos da (2.56).

Ahora bien, para la formulación macrohíbrida del problema (M), la formulación variacional dual de las condiciones de transmisión (2.54)-(2.55) pueden ser expresadas como

$$(DT) \begin{cases} -\delta_e(u_e) = g_e^*, & \text{sobre } \Gamma_e, \quad 1 \leq e \leq E, \\ \{\gamma_e u_e\} \in \partial I_{Q_N^*}(\{g_e^*\}), \end{cases} \quad (2.62)$$

donde, $\{g_e^*\} \in \prod_{e=1}^E B^*(\Gamma_e)$ es el nuevo campo dual de valores Neumann de frontera interna para el problema descompuesto.

Insertando las condiciones de transmisión dualizadas (DT) en el problema macrohíbrido mixto (MH), se obtiene la formulación variacional macrohíbrida dual del problema mixto (M).

$$(MHM) \begin{cases} \text{Encuentre } (u_e, p_e^*) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_e) \times \mathcal{D}(G_e^*), \text{ para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -\Lambda_e^T p_e^* - \gamma_e^T g_e^* \in \mathcal{A}_e(u_e), \\ \Lambda_e u_e \in \partial G_e^*(p_e^*), \\ \text{y } \{g_e^*\} \in Q_N^* \text{ satisfaciendo las condiciones de sincronización,} \\ \{\gamma_e u_e\} \in \partial I_{Q_N^*}(\{g_e^*\}). \end{cases} \quad (2.63)$$

La formulación variacional macrohíbrida de un problema mixto permite el tratamiento local en paralelo de un problema a nivel de subdominios, ya que la sincronización global ha sido

dualizada. Estas propiedades serán explotadas cuando se resuelva numéricamente el problema bifásico. Por el momento, se aplicará esta metodología para formular variacionalmente el modelo de flujo bifásico.

2.5 FORMULACIÓN VARIACIONAL MACROHÍBRIDA MIXTA PARA FLUJO BIFÁSICO

En esta sección se aplica la metodología presentada en las secciones anteriores, con el propósito de desarrollar la formulación variacional para el modelo mixto macrohíbrido de flujo bifásico, desarrollado en la última sección del capítulo anterior. El modelo macrohíbrido mixto bifásico que se formulará variacionalmente está expresado para $e = \{1, 2, \dots, E\}$

$$(MHMB) \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_e = -\mathbf{K}_e \lambda_e (\mathbf{grad} p_e - (\lambda_{w,e} \rho_{w,e} + \lambda_{n,e} \rho_{n,e}) \mathbf{g}), \\ \operatorname{div} \mathbf{u}_e = \hat{q}_e, \\ \mathbf{w}_e = -D_e(s) \mathbf{K}_e \left(\mathbf{grad} s_e - \frac{(\rho_{w,e} - \rho_{n,e})}{p'_{c,e}(s)} \mathbf{g} \right), \\ \phi_e \frac{ds_e}{dt} + \operatorname{div} \mathbf{w}_e = (\lambda_{n,e} \hat{q}_{w_e} - \lambda_{w,e} \hat{q}_{n_e}), \end{array} \right\} \quad \text{en } \Omega_e \times (0, T), \quad (2.64)$$

donde,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{ds_e}{dt} = \frac{\partial s_e}{\partial t} + \mathbf{b}_e \cdot \mathbf{grad} s_e, \\ \mathbf{b}_e = \frac{\lambda'_{w_e} \mathbf{u}_e}{\phi_e}. \end{array} \right. \quad (2.65)$$

Ahora bien, de acuerdo con Pironneau [46], la aproximación temporal discreta de (2.65₁) se puede expresar como

$$\left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{grad} s \right)^{m+1} \cong \frac{1}{\Delta t} (s^{m+1}(x) - s^m(X^m(x))) \quad (2.66)$$

donde, $X^m(x)$ es una aproximación de $X(x, (m+1)\Delta t; m\Delta t)$ que puede ser expresada por medio de un esquema de Euler como

$$X^m(x) = x - \mathbf{b}^m(x) \Delta t. \quad (2.67)$$

Entonces, el sistema semidiscreto (MHMB) puede ser expresado en forma discreta (MHMBD) como

$$(\text{MHMBD}) \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_e^m = -\mathbf{K}_e \lambda_e^m (\mathbf{grad} p_e^m - (\lambda_{w,e} \rho_{w,e} + \lambda_{n,e} \rho_{n,e})^m \mathbf{g}), \\ \operatorname{div} \mathbf{u}_e^m = \hat{q}_e^m, \\ \mathbf{w}_e^{m+1} = -D_e^{m+1}(s) \mathbf{K}_e \left(\mathbf{grad} s_e^{m+1} - \frac{(\rho_{w,e} - \rho_{n,e})}{p_{c,e}(s)} \mathbf{g} \right), \\ \phi_e s_e^{m+1} + \Delta t \operatorname{div} \mathbf{w}_e^{m+1} = \phi_e s_e^m (X^m) + \Delta t (\lambda_{n,e} \hat{q}_{w_e} - \lambda_{w_e} \hat{q}_{n_e})^{m+1}, \end{array} \right\} \text{ en } \Omega_e \times (0, T), \quad (2.68)$$

en donde, cada subproblema $\{e\}$ está sujeto a cumplir las condiciones de continuidad en los campos velocidad total, presión global, flujo de saturación y saturación a través de las interfaces Γ_{ek}

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e = -\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k, \\ p_e = p_k, \\ \mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e = -\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{n}_k, \\ s_e = s_k, \end{array} \right\} \text{ a través de } \Gamma_{ek} \times (0, T), \quad (2.69)$$

y las condiciones de frontera externa especificadas para cada subdominio Ω_e , esto es, para $e = \{1, 2, \dots, E\}$

$$\begin{array}{ll} \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e = \hat{u}_{n,e}, & \text{sobre } \partial\Omega_{N,e}^p \times (0, T), \\ p_e = \hat{p}_e, & \text{sobre } \partial\Omega_{D,e}^p \times (0, T), \\ \mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e = \hat{w}_{n,e}, & \text{sobre } \partial\Omega_{N,e}^s \times (0, T), \\ s_e = \hat{s}_e, & \text{sobre } \partial\Omega_{D,e}^s \times (0, T). \end{array} \quad (2.70)$$

Además, considerando que el segundo conjunto de subproblemas es explícitamente dependiente del tiempo, se establece como condición inicial, la saturación en cada subdominio Ω_e , para $e = \{1, 2, \dots, E\}$

$$s_e(x, 0) = s_{0,e}(x) \quad x \in \Omega_e. \quad (2.71)$$

Para la formulación variacional del modelo (MHMBD), se asocian los campos (velocidad total-flujo de saturación) y (presión global-saturación) con los espacios funcionales

$$\mathbf{V}(\Omega_e) = \mathbf{H}(\operatorname{div}, \Omega_e) = \left\{ \mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(\Omega_e) : \operatorname{div} \mathbf{v} \in L^2(\Omega_e) \right\}, \quad 1 \leq e \leq E, \quad (2.72)$$

$$Y(\Omega_e) = L^2(\Omega_e), \quad 1 \leq e \leq E, \quad (2.73)$$

respectivamente, y los campos de frontera interna (velocidad total normal-flujo de saturación normal) y (trazas de presión global-saturación), con los espacios funcionales $B(\Gamma_e)$ y $B^*(\Gamma_e)$, siendo

$$B(\Gamma_e) = H^{1/2}(\Gamma_e) \quad \text{y su dual} \quad B^*(\Gamma_e) = H^{-1/2}(\Gamma_e), \quad 1 \leq e \leq E. \quad (2.74)$$

Entonces, las condiciones de transmisión (2.69) quedan expresadas para $t \in (0, T)$ por

$$\begin{aligned} \{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\}, \{\mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e\} &\in \mathbf{Q}_D, \\ \{p_e\}, \{s_e\} &\in \mathbf{Q}_N^*, \end{aligned} \tag{2.75}$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_D &= \left\{ \{v_{n_e}\} \in \mathbf{B}(\{\Gamma_e\}) = \prod_{e=1}^E B(\Gamma_e) : v_{n_e} = -v_{n_k}, \quad \text{sobre } \Gamma_{ek}, \right\} \\ \mathbf{Q}_N^* &= \left\{ \{q_e\} \in \mathbf{B}^\square(\{\Gamma_e\}) = \prod_{e=1}^E B^*(\Gamma_e) : q_e = q_k, \quad \text{sobre } \Gamma_{ek}. \right\} \end{aligned} \tag{2.76}$$

Denotando por \mathbf{I}_{Q_D} e $\mathbf{I}_{Q_N^*}$ los funcionales indicatrices asociados a los subespacios admisibles de transmisión primal Q_D y dual Q_N^* de (2.74), se sigue que sus subdiferenciales satisfacen las relaciones

$$\begin{aligned} \partial \mathbf{I}_{Q_D}(\{v_{n_e}\}) &= \mathbf{Q}_N^*, & \forall \{v_{n_e}\} \in \mathbf{B}(\{\Gamma_e\}), \\ \partial \mathbf{I}_{Q_N^*}(\{q_e\}) &= \mathbf{Q}_D, & \forall \{q_e\} \in \mathbf{B}^*(\{\Gamma_e\}), \end{aligned} \tag{2.77}$$

y en consecuencia, las condiciones (2.69) tienen como formulaciones variacionales las equivalentes ecuaciones subdiferenciales monótonas primal y dual

$$\{p_e\} \in \partial \mathbf{I}_{Q_D}(\{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\}) \Leftrightarrow \{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\} \in \partial \mathbf{I}_{Q_N^*}(\{p_e\}), \tag{2.78}$$

$$\{s_e\} \in \partial \mathbf{I}_{Q_D}(\{\mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e\}) \Leftrightarrow \{\mathbf{w}_e \cdot \mathbf{n}_e\} \in \partial \mathbf{I}_{Q_N^*}(\{s_e\}), \tag{2.79}$$

respectivamente.

Por lo tanto, considerando las formulaciones duales de las condiciones de transmisión (2.75), (2.78₂) y (2.79₂), e introduciendo los nuevos campos duales de presión global de frontera interna r_e , y saturación de frontera interna ρ_e , para $1 \leq e \leq E$

$$\begin{aligned} r_e &= p_e, & \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T), \\ \rho_e &= s_e, & \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T), \end{aligned} \tag{2.80}$$

se expresa la formulación variacional macrohíbrida mixta para el modelo de flujo bifásico discreto (MHMBD) de la siguiente manera.

Para las primeras dos ecuaciones de (MHMBD) se tiene

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} (\lambda_e^m(s_e) \mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{v} \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} p_e^m \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\partial \Omega_{D_e}^p} \widehat{p}_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega \\ &- \int_{\Gamma_e} r_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega_e} (\lambda_{w_e}^m(s_e) \rho_w + \lambda_{n_e}^m(s_e) \rho_n) \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, & \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{\mathbf{0}_{\mathbf{n}_e}}, \\ \int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{u}_e^m q \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} \widehat{q}_e^m q \, d\Omega, & \forall q \in Y(\Omega_e). \end{aligned}$$

Para las dos últimas ecuaciones de (MHMBD) se tiene

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_e} (D_e^{m+1}(s_e)\mathbf{K}_e)^{-1}\mathbf{w}_e^{m+1}\cdot\mathbf{v} \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} s_e^{m+1} \operatorname{div}\mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{D_e}^s} \widehat{s}_e^{m+1}\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} \, d\partial\Omega \\
&\quad - \int_{\Gamma_e} \rho_e \mathbf{v}\cdot\mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega_e} \frac{(\rho_w - \rho_n)}{p'_{c_e}(s_e)} \mathbf{g}\cdot\mathbf{v} \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{0_{\mathbf{n}_e}}, \\
\int_{\Omega_e} \phi_e s_e^{m+1} q \, d\Omega + \Delta t \int_{\Omega_e} \operatorname{div}\mathbf{w}_e^{m+1} q \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} \phi_e s_e^m (X^m) q \, d\Omega \\
&\quad + \Delta t \int_{\Omega_e} (\lambda_{n_e}(s_e)\widehat{q}_{w_e} - \lambda_{w_e}(s_e)\widehat{q}_{n_e})^{m+1} q \, d\Omega, \quad \forall q \in Y(\Omega_e).
\end{aligned}$$

Entonces, de manera conjunta la formulación variacional macrohíbrida mixta para el modelo de flujo bifásico discreto (MHMBD), queda expresada de la siguiente manera.

$$\left. \begin{aligned}
& \text{Encuentre } (\mathbf{u}_e, p_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\hat{u}_{ne}} \times Y(\Omega_e) \\
& \quad \text{y } (\mathbf{w}_e, s_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\hat{w}_{ne}} \times Y(\Omega_e), \\
& \text{con la condición inicial, } s_e(x, 0) = s_{0_e}(x) \in \Omega_e, \quad \text{para } e = 1, \dots, E : \\
& \int_{\Omega_e} (\lambda_e^m(s_e) \mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega_e} p_e^m \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{D_e}^p} \hat{p}_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega \\
& \quad - \int_{\Gamma_e} r_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega_e} (\lambda_{w_e}^m(s_e) \rho_w + \lambda_{n_e}^m(s_e) \rho_n) \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{0_{ne}}, \\
& \quad \int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{u}_e^m q \, d\Omega = \int_{\Omega_e} \hat{q}_e^m q \, d\Omega \quad \forall q \in Y(\Omega_e), \\
& \int_{\Omega_e} (D_e^{m+1}(s_e) \mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{w}_e^{m+1} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega_e} s_e^{m+1} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{D_e}^s} \hat{s}_e^{m+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega \\
& \quad - \int_{\Gamma_e} \rho_e^{m+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega_e} \frac{(\rho_w - \rho_n)}{p'_{c_e}(s_e)} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{0_{ne}}, \\
& \int_{\Omega_e} \phi_e s_e^{m+1} q \, d\Omega + \Delta t \int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{w}_e^{m+1} q \, d\Omega = \int_{\Omega_e} \phi_e s_e^m (X^m) q \, d\Omega \\
& \quad + \Delta t \int_{\Omega_e} (\lambda_{n_e}(s_e) \hat{q}_{w_e} - \lambda_{w_e}(s_e) \hat{q}_{n_e})^{m+1} q \, d\Omega, \quad \forall q \in Y(\Omega_e), \\
& \text{y } \{r_e\}, \{\rho_e\} : (0, T) \rightarrow Q_N^* \text{ satisfaciendo las condiciones de sincronización,} \\
& 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - r_e) \, d\Gamma, \quad \forall \{\eta_e\} \in Q_N^*, \\
& 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{w}_e^{m+1} \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - \rho_e) \, d\Gamma, \quad \forall \{\eta_e\} \in Q_N^*.
\end{aligned} \right\} \text{(MHMBD)}$$

El siguiente paso en la búsqueda de una solución para el problema (MHMBD), consistirá en replantear este problema en espacios de dimensión finita, en donde se buscará una solución aproximada para los campos (velocidad total, presión global, flujo de saturación y saturación), trabajo que se realizará en el siguiente capítulo.

Capítulo 3

MODELOS MACROHÍBRIDOS MIXTOS DISCRETOS

INTRODUCCIÓN

El propósito de este capítulo, es replantear un modelo macrohíbrido mixto en espacios de dimension finita. Para ello, se presenta en esta sección una versión macrohíbrida del método de elemento finito mixto para aproximaciones discretas de problemas de valores a la frontera, el cual tiene ventajas numéricas sobre los enfoques primal o dual [21, 40, 41], ya que permite aproximar de manera independiente los campos incógnita. Una vez hecha la presentación teórica del método, se aplica al problema de flujo bifásico en medios porosos.

3.1 DISCRETIZACIONES ESPACIALES

En la discretización espacial de los espacios funcionales asociados con un problema mixto, las aproximaciones internas de elemento finito mixto son definidas sobre subespacios de dimensión finita, y permiten establecer soluciones variacionales discretas de dicho problema. Esta característica de las aproximaciones internas aunado a un enfoque macrohíbrido del problema, permite generar modelos de elemento finito mixto que en general, son globalmente no-conformes, esto es, en cada subdominio se plantea una solución aproximada propia, en forma independiente de las soluciones en los demas subdominios.

Para desarrollar esto, partimos de la formulación variacional macrohíbrida dual de un problema mixto, desarrollado en el capítulo anterior.

$$(MHM) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (u_e, p_e^*) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_e) \times \mathcal{D}(G_e^*), \text{ para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -\Lambda_e^T p_e^* - \gamma_e^T g_e^* \in \mathcal{A}_e(u_e), \\ \Lambda_e u_e \in \partial G_e^*(p_e^*), \\ \text{y } \{g_e^*\} \in Q_N^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\ \{\gamma_e u_e\} \in \partial I_{Q_N^*}(\{g_e^*\}), \end{array} \right. \quad (3.1)$$

donde, $\mathcal{D}(\mathcal{A}_e) = \{v_e \in V(\Omega_e) : \mathcal{A}_e(v_e) \neq \emptyset\}$ es el dominio efectivo de \mathcal{A}_e y, $\mathcal{D}(G_e^*) = \{q_e^* \in Y^*(\Omega_e) : G_e^*(q_e^*) < +\infty\}$ el dominio efectivo de G_e^* , siendo $V(\Omega_e)$ y $Y^*(\Omega_e)$ espacios de Banach reflexivos reales con espacios duales denotados por $V^*(\Omega_e)$ y $Y(\Omega_e)$ respectivamente.

$\mathcal{A}_e : V(\Omega_e) \rightarrow 2^{V^*(\Omega_e)}$ es un operador monótono maximal y, $\Lambda_e \in \mathcal{L}(V(\Omega_e), Y(\Omega_e))$ un operador lineal y continuo con transpuesto $\Lambda_e^T \in \mathcal{L}(Y^*(\Omega_e), V^*(\Omega_e))$. También, $G_e : Y(\Omega_e) \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ es un funcional convexo semicontinuo inferiormente y propio, con conjugado $G_e^* : Y^*(\Omega_e) \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$. Además, sean $B(\Gamma_e)$ y su dual $B^*(\Gamma_e)$, los respectivos espacios de frontera interna Dirichlet y Neumann, con operadores traza Dirichlet y Neumann denotados por $\gamma_e \in \mathcal{L}(V(\Omega_e), B(\Gamma_e))$ y $\delta_e : V(\Omega_e) \rightarrow B^*(\Gamma_e)$, respectivamente. Se denotará por $\gamma_e^T \in \mathcal{L}(B^*(\Gamma_e), V^*(\Omega_e))$ el transpuesto del operador Dirichlet.

Con el propósito de homogeneizar la notación que se usará de aquí en adelante, se reescribe el modelo (MHM) en la siguiente forma.

$$(MHM) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (u_e, p_e^*) \in V(\Omega_e) \times Y^*(\Omega_e), \text{ para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -\Lambda_e^T p_e^* - \gamma_e^T \lambda_e^* \in \mathcal{A}_e(u_e), \\ \Lambda_e u_e \in \partial G_e^*(p_e^*), \\ \text{y } \{\lambda_e^*\} \in B^*(\{\Gamma_e\}) \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\ \{\gamma_e u_e\} \in \partial I_{Q_N^*}(\{\lambda_e^*\}), \end{array} \right. \quad (3.2)$$

donde, se observan las siguientes identificaciones,

$$\begin{aligned} V(\Omega_e) &\equiv \mathcal{D}(\mathcal{A}_e), \\ Y^*(\Omega_e) &\equiv \mathcal{D}(G_e^*), \\ B^*(\{\Gamma_e\}) &\equiv \prod_{e=1}^E B^*(\Gamma_e), \\ \{\lambda_e^*\} &\equiv \{g_e^*\}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Para establecer la version discreta del problema variacional macrohíbrido mixto (MHM), se introducen las siguientes familias de espacios de elemento finito.

Para $e = 1, 2, \dots, E$, sean

$$V_{h_e} \subset V(\Omega_e), \quad (3.4)$$

$$Y_{h_e} \subset L(\Omega_e) \subset Y^*(\Omega_e), \quad (3.5)$$

$$B_{h_e} \subset M(\Gamma_e) \subset B^*(\Gamma_e), \quad (3.6)$$

los espacios de elemento finito localmente conformes, con parámetro de malla $h_e > 0$.

Aquí, $L(\Omega_e)$ y $M(\Gamma_e)$ denotan los correspondientes espacios pivote de Hilbert. Entonces, expresando los campos primales y duales en sus respectivas aproximaciones de elemento finito locales por

$$\{u_{h_e}\} \in \prod_{e=1}^E V_{h_e}, \quad (3.7)$$

$$\{p_{h_e}^*\} \in \prod_{e=1}^E Y_{h_e}, \quad (3.8)$$

$$\{\lambda_{h_e}^*\} \in \prod_{e=1}^E B_{h_e} \supset Q_{N_h}^*, \quad (3.9)$$

se puede establecer la versión discreta (MHM_h) del problema macrohíbrido mixto (MHM), de acuerdo a lo siguiente.

$$(MHM_h) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (u_{h_e}, p_{h_e}^*) \in V_{h_e} \times Y_{h_e}, \text{ para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -\Lambda_{h_e}^T p_{h_e}^* - \gamma_{h_e}^T \lambda_{h_e}^* \in \mathcal{A}_{h_e}(u_{h_e}), \\ \Lambda_{h_e} u_{h_e} \in \partial G_{h_e}^*(p_{h_e}^*), \\ \text{y } \{\lambda_{h_e}^*\} \in \prod_{e=1}^E B_{h_e} \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\ \{\gamma_{h_e} u_{h_e}\} \in \partial I_{Q_N^*}(\{\lambda_{h_e}^*\}), \end{array} \right. \quad (3.10)$$

donde, la versión discreta de los operadores está dada por

$$\mathcal{A}_{h_e} = \mathcal{A} : V_{h_e} \rightarrow 2^{V_{h_e}}, \quad (3.11)$$

$$G_{h_e}^* = G^* : Y_{h_e} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}, \quad (3.12)$$

$$\Lambda_{h_e} \in \mathcal{L}(V_{h_e}, Y_{h_e}), \quad (3.13)$$

$$\gamma_{h_e} \in \mathcal{L}(V_{h_e}, B_{h_e}), \quad (3.14)$$

$$\delta_{h_e} \in \mathcal{L}(V_{h_e}, B_{h_e}). \quad (3.15)$$

Además, las versiones discretas de los subespacios admisibles de transmisión, están consideradas de acuerdo a

$$Q_{D_h} = \left\{ \{q_{h_e}\} \in \prod_{e=1}^E B_{h_e} : q_{h_e} = q_{h_f} \text{ sobre } \Gamma_{ef}, \quad 1 \leq e < f \leq E \right\}, \quad (3.16)$$

$$Q_{N_h}^* = \left\{ \{q_{h_e}^*\} \in \prod_{e=1}^E B_{h_e} : q_{h_e}^* = -q_{h_f}^* \text{ sobre } \Gamma_{ef}, \quad 1 \leq e < f \leq E \right\}, \quad (3.17)$$

para los cuales, la caracterización subdiferencial de las condiciones de transmisión continúa siendo válida [13], de acuerdo al siguiente.

Lemma 3.1. El campo primal discreto descompuesto $\{u_{h_e}\} \in \prod_{e=1}^E V_{h_e}$ satisface las restricciones de transmisión discretas

$$\{\gamma_{h_e} u_{h_e}\} \in Q_{D_h} \quad \text{y} \quad -\{\delta_{h_e}(u_{h_e})\} \in Q_{N_h}^* \quad (3.18)$$

si, y solo si, se satisfacen las correspondientes ecuaciones subdiferenciales monótonas discretas primal y dual

$$-\{\delta_{h_e}(u_{h_e})\} \in \partial I_{Q_{D_h}}(\{\gamma_{h_e} u_{h_e}\}) \Leftrightarrow \{\gamma_{h_e} u_{h_e}\} \in \partial I_{Q_{D_h}^*}(-\{\delta_{h_e}(u_{h_e})\}). \quad (3.19)$$

La versión discreta de un problema macrohíbrido mixto (MHM_h) presentada en esta sección, será usada como base en la construcción de la correspondiente versión discreta del modelo de flujo bifásico.

3.2 MODELO MACROHÍBRIDO MIXTO DISCRETO BIFÁSICO

Para desarrollar la versión espacial discreta del modelo de flujo bifásico, se parte de la formulación variacional macrohíbrida mixta discreta del modelo de flujo bifásico (MHMBD), desarrollada en el capítulo anterior.

$$\left. \begin{aligned}
 & \text{Encuentre } (\mathbf{u}_e, p_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\hat{u}_{ne}} \times Y(\Omega_e) \\
 & \quad \text{y } (\mathbf{w}_e, s_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\hat{w}_{ne}} \times Y(\Omega_e), \\
 & \text{con la condición inicial, } s_e(x, 0) = s_{0_e}(x) \in \Omega_e, \quad \text{para } e = 1, \dots, E : \\
 & \int_{\Omega_e} (\lambda_e^m(s_e) \mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega_e} p_e^m \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{D_e}^p} \hat{p}_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega \\
 & \quad - \int_{\Gamma_e} r_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega_e} (\lambda_{w_e}^m(s_e) \rho_w + \lambda_{n_e}^m(s_e) \rho_n) \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{0_{ne}}, \\
 & \quad \int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{u}_e^m q \, d\Omega = \int_{\Omega_e} \hat{q}_e^m q \, d\Omega \quad \forall q \in Y(\Omega_e), \\
 & \int_{\Omega_e} (D_e^{m+1}(s_e) \mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{w}_e^{m+1} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega_e} s_e^{m+1} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{D_e}^s} \hat{s}_e^{m+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega \\
 & \quad - \int_{\Gamma_e} \rho_e^{m+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega_e} \frac{(\rho_w - \rho_n)}{p'_{c_e}(s_e)} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{0_{ne}}, \\
 & \int_{\Omega_e} \phi_e s_e^{m+1} q \, d\Omega + \Delta t \int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{w}_e^{m+1} q \, d\Omega = \int_{\Omega_e} \phi_e s_e^m (X^m) q \, d\Omega \\
 & \quad + \Delta t \int_{\Omega_e} (\lambda_{n_e}(s_e) \hat{q}_{w_e} - \lambda_{w_e}(s_e) \hat{q}_{n_e})^{m+1} q \, d\Omega, \quad \forall q \in Y(\Omega_e), \\
 & \text{y } \{r_e\}, \{\rho_e\} : (0, T) \rightarrow Q_N^* \text{ satisfaciendo las condiciones de sincronización,} \\
 & 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - r_e) \, d\Gamma, \quad \forall \{\eta_e\} \in Q_N^*, \\
 & 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{w}_e^{m+1} \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - \rho_e) \, d\Gamma, \quad \forall \{\eta_e\} \in Q_N^*.
 \end{aligned} \right\} \text{(MHMBD)}$$

Como puede observarse en el sistema anterior, el modelo (MHMBD) está compuesto de hecho por dos modelos mixtos macrohíbridos. El primero de ellos está planteado para los campos velocidad total-presión global (\mathbf{u}_e, p_e), y el segundo, para los campos flujo de saturación-saturación (\mathbf{w}_e, s_e). Para propósitos de claridad, el modelo (MHMBD) será separado en sus partes constitutivas, y se desarrollará en forma paralela cada una de sus componentes.

La componente velocidad total-presión global (\mathbf{u}_e, p_e) queda expresada como

$$\left. \begin{array}{l}
 \text{Encuentre } (\mathbf{u}_e, p_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\widehat{u}_{ne}} \times Y(\Omega_e), \\
 \text{para } e = 1, 2, \dots, E : \\
 \int_{\Omega_e} (\lambda_e^m(s_e)\mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega_e} p_e^m \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{D_e}^p} \widehat{p}_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega \\
 \quad - \int_{\Gamma_e} r_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega_e} (\lambda_{w_e}^m(s_e)\rho_w + \lambda_{n_e}^m(s_e)\rho_n) \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{0_{ne}}, \\
 \int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{u}_e^m q \, d\Omega = \int_{\Omega_e} \widehat{q}_e^m q \, d\Omega \quad \forall q \in Y(\Omega_e), \\
 \text{y, } \{r_e\} : (0, T) \rightarrow Q_N^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\
 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - r_e) \, d\Gamma, \quad \forall \{\eta_e\} \in Q_N^*.
 \end{array} \right\} \text{(MHMBD1)}$$

Y la componente flujo de saturación-saturación (\mathbf{w}_e, s_e) , como

$$\left. \begin{array}{l}
 \text{Encuentre } (\mathbf{w}_e, s_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\widehat{w}_{ne}} \times Y(\Omega_e), \\
 \text{con la condición inicial, } s_e(x, 0) = s_{0,e}(x) \text{ para } e = 1, 2, \dots, E : \\
 \int_{\Omega_e} (D_e^{m+1}(s_e)\mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{w}_e^{m+1} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega_e} s_e^{m+1} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{D_e}^s} \widehat{s}_e^{m+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega \\
 \quad - \int_{\Gamma_e} \rho_e^{m+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega_e} \frac{(\rho_w - \rho_n)}{p'_{c_e}(s_e)} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{0_{ne}}, \\
 \int_{\Omega_e} \phi_e s_e^{m+1} q \, d\Omega + \Delta t \int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{w}_e^{m+1} q \, d\Omega = \int_{\Omega_e} \phi_e s_e^m (X^m) q \, d\Omega \\
 \quad + \Delta t \int_{\Omega_e} (\lambda_{n_e}(s_e) \widehat{q}_{w_e} - \lambda_{w_e}(s_e) \widehat{q}_{n_e})^{m+1} q \, d\Omega, \quad \forall q \in Y(\Omega_e), \\
 \text{y, } \{\rho_e\} : (0, T) \rightarrow Q_N^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\
 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{w}_e^{m+1} \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - \rho_e) \, d\Gamma, \quad \forall \{\eta_e\} \in Q_N^*.
 \end{array} \right\} \text{(MHMBD2)}$$

Para la aproximación espacial de los subespacios locales velocidad total, presión global, flujo de saturación y saturación, de los modelos variacionales macrohíbridos mixtos (MHMBD1) y (MHMBD2), se utilizarán espacios de elemento finito mixto localmente conformes [9, 13, 15] de la siguiente manera. Para los subespacios locales (velocidad total-flujo de saturación) y (presión global-saturación), se tienen los subespacios

$$\mathbf{V}_{h_e} = [\phi_{e,1}, \phi_{e,2}, \dots, \phi_{e,n_h}] \subset \mathbf{V}(\Omega_e) = \mathbf{H}(\operatorname{div}, \Omega_e), \quad (3.20)$$

$$\mathbf{Y}_{h_e} = [\zeta_{e,1}, \zeta_{e,2}, \dots, \zeta_{e,n_h}] \subset Y(\Omega_e) = L^2(\Omega_e), \quad (3.21)$$

respectivamente.

Para los subespacios locales (presión global de frontera interna-saturación de frontera interna), se consideran

$$\mathbf{B}_{he}(\Gamma_e) = [\xi_{e,1}, \xi_{e,2}, \dots, \xi_{e,k_h}] \subset L^2(\Gamma_e) \subset B^*(\Gamma_e) = H^{-1/2}(\Gamma_e). \quad (3.22)$$

Entonces, los campos velocidad total, presión global, flujo de saturación, saturación, presión global de frontera interna y saturación de frontera interna, quedan expresados por medio de

$$\mathbf{u}_{he} = \sum_{j=1}^{nh} \alpha_{ue,j} \phi_{e,j} \in \mathbf{V}_{he} \quad \text{velocidad total} \quad (3.23)$$

$$p_{he} = \sum_{k=1}^{mh} \lambda_{e,k} \zeta_{e,k} \in \mathbf{Y}_{he} \quad \text{presión global} \quad (3.24)$$

$$\mathbf{w}_{he} = \sum_{j=1}^{nh} \alpha_{we,j} \phi_{e,j} \in \mathbf{V}_{he} \quad \text{flujo de saturación} \quad (3.25)$$

$$s_{he} = \sum_{k=1}^{mh} \vartheta_{e,k} \zeta_{e,k} \in \mathbf{Y}_{he} \quad \text{saturación} \quad (3.26)$$

y

$$r_{he} = \sum_{l=1}^{kh} \pi_{e,l} \xi_{e,l} \in \mathbf{B}_{he} \quad \text{presión global de frontera interna} \quad (3.27)$$

$$\rho_{he} = \sum_{l=1}^{kh} \varrho_{e,l} \xi_{e,l} \in \mathbf{B}_{he} \quad \text{saturación de frontera interna} \quad (3.28)$$

cuyas coordenadas de elemento finito serán establecidas al resolver los problemas discretos (MHMBD1) y (MHMBD2) asociados.

Para obtener las versiones espaciales discretas de (MHMBD1) y (MHMBD2), se hace uso de las expresiones (3.23-3.28). Entonces, sustituyendo los campos continuos por sus correspondientes expresiones discretas, se obtiene.

La primera ecuación de (MHMBD1) tiene la expresión

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} (\lambda_e^m(s_e) \mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{v} \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} p_e^m \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\Gamma_e} r_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma \\ - \int_{\partial\Omega_{D_e}^p} \hat{p}_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega &+ \int_{\Omega_e} (\lambda_{w_e}^m(s_e) \rho_w + \lambda_{n_e}^m(s_e) \rho_n) \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \end{aligned}$$

y la aproximación de elemento finito para cada término de esta ecuación es

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_e} (\lambda_e^m(s_e) \mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{v} \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} (\lambda_e^m(s_e) \mathbf{K}_e)^{-1} (\boldsymbol{\phi}^T \boldsymbol{\alpha}_u^m) \cdot (\boldsymbol{\phi}^T \boldsymbol{\beta}) \, d\Omega = \mathbf{A}_{ue}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{ue}^m \cdot \boldsymbol{\beta}, \\
\int_{\Omega_e} p_e^m \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} (\boldsymbol{\zeta}^T \boldsymbol{\lambda}^m) \operatorname{div}(\boldsymbol{\phi}^T \boldsymbol{\beta}) \, d\Omega = -\mathbf{L}_e^T \boldsymbol{\lambda}_e^m \cdot \boldsymbol{\beta}, \\
\int_{\Gamma_e} r_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma &= \int_{\Gamma_e} (\boldsymbol{\xi}^T \boldsymbol{\pi}^m) (\boldsymbol{\phi}^T \boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = \mathbf{T}_e^T \boldsymbol{\pi}_e^m \cdot \boldsymbol{\beta}, \\
-\int_{\partial\Omega_{D_e}^p} \widehat{p}_e^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega &+ \int_{\Omega_e} (\lambda_{w_e}^m(s_e) \rho_w + \lambda_{n_e}^m(s_e) \rho_n) \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = \\
-\int_{\partial\Omega_{D_e}^p} \widehat{p}_e^m \boldsymbol{\phi}^T \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega &+ \int_{\Omega_e} (\lambda_{w_e}^m(s_e) \rho_w + \lambda_{n_e}^m(s_e) \rho_n) \mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\phi}^T \boldsymbol{\beta} \, d\Omega = \mathbf{f}_{ue}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) \cdot \boldsymbol{\beta}.
\end{aligned}$$

Entonces, la primera ecuación de (MHMBD1) queda expresada en su forma espacial discreta como

$$-(\mathbf{L}_e^T \boldsymbol{\lambda}_e^m + \mathbf{T}_e^T \boldsymbol{\pi}_e^m) \cdot \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{A}_{ue}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{ue}^m - \mathbf{f}_{ue}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e)) \cdot \boldsymbol{\beta}. \quad (3.29)$$

La segunda ecuación de (MHMBD1) está dada por

$$\int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{u}_e^m q \, d\Omega = \int_{\Omega_e} \widehat{q}_e^m q \, d\Omega,$$

y su aproximación de elemento finito para cada término es

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{u}_e^m q \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} \operatorname{div}(\boldsymbol{\phi}^T \boldsymbol{\alpha}_u^m) (\boldsymbol{\zeta}^T \boldsymbol{\mu}) \, d\Omega = -\mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{ue}^m \cdot \boldsymbol{\mu}, \\
\int_{\Omega_e} \widehat{q}_e^m q \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} \widehat{q}_e^m \boldsymbol{\zeta}^T \boldsymbol{\mu} \, d\Omega = \widehat{\mathbf{q}}_{pe}^m \cdot \boldsymbol{\mu}.
\end{aligned}$$

Entonces, la segunda ecuación de (MHMBD1) queda expresada como

$$\mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{ue}^m \cdot \boldsymbol{\mu} = -\widehat{\mathbf{q}}_{pe}^m \cdot \boldsymbol{\mu}. \quad (3.30)$$

La primera ecuación de (MHMBD2) está dada por

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_e} (D_e^{m+1}(s_e) \mathbf{K}_e)^{-1} \mathbf{w}_e^{m+1} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega &= \int_{\Omega_e} s_e^{m+1} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\Gamma_e} \rho_e^{m+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma \\
&- \int_{\partial\Omega_{D_e}^s} \widehat{s}_e^{m+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega + \int_{\Omega_e} \frac{(\rho_w - \rho_n)}{p'_{c_e}(s_e)} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega,
\end{aligned}$$

y su correspondiente aproximación de elemento finito, término a término es

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_e} (D_e^{m+1}(s_e)\mathbf{K}_e)^{-1}\mathbf{w}_e^{m+1}\cdot\mathbf{v} d\Omega &= \int_{\Omega_e} (D_e^{m+1}(s_e)\mathbf{K}_e)^{-1}(\boldsymbol{\phi}^T\boldsymbol{\alpha}_w^{m+1})\cdot(\boldsymbol{\phi}^T\boldsymbol{\beta}) d\Omega = \mathbf{A}_{we}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e)\boldsymbol{\alpha}_{we}^{m+1}\cdot\boldsymbol{\beta}, \\
\int_{\Omega_e} s_e^{m+1}div\mathbf{v} d\Omega &= \int_{\Omega_e} (\boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\vartheta}^{m+1})div(\boldsymbol{\phi}^T\boldsymbol{\beta}) d\Omega = -\mathbf{L}_e^T\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1}\cdot\boldsymbol{\beta}, \\
\int_{\Gamma_e} \rho_e^{m+1}\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} d\Gamma &= \int_{\Gamma_e} (\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{\varrho}^{m+1})(\boldsymbol{\phi}^T\boldsymbol{\beta})\cdot\mathbf{n} d\Gamma = \mathbf{T}_e^T\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}\cdot\boldsymbol{\beta}, \\
&- \int_{\partial\Omega_{D_e}^s} \widehat{s}_e^{m+1}\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} d\partial\Omega + \int_{\Omega_e} \frac{(\rho_w - \rho_n)}{p'_{c_e}(s_e)}\mathbf{g}\cdot\mathbf{v} d\Omega = \\
&- \int_{\partial\Omega_{D_e}^s} \widehat{s}_e^{m+1}(\boldsymbol{\phi}^T\boldsymbol{\beta})\cdot\mathbf{n} d\partial\Omega + \int_{\Omega_e} \frac{(\rho_w - \rho_n)}{p'_{c_e}(s_e)}\mathbf{g}\cdot(\boldsymbol{\phi}^T\boldsymbol{\beta}) d\Omega = \mathbf{f}_{we}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e)\cdot\boldsymbol{\beta}.
\end{aligned}$$

Entonces, la versión espacial discreta de la primera ecuación de (MHMBD2) queda expresada como

$$-(\mathbf{L}_e^T\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} + \mathbf{T}_e^T\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1})\cdot\boldsymbol{\beta} = (\mathbf{A}_{we}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e)\boldsymbol{\alpha}_{we}^{m+1} - \mathbf{f}_{we}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e))\cdot\boldsymbol{\beta}. \quad (3.31)$$

La segunda ecuación de (MHMBD2) está dada por

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_e} \phi_e s_e^{m+1}q d\Omega + \Delta t \int_{\Omega_e} div\mathbf{w}_e^{m+1}q d\Omega &= \int_{\Omega_e} \phi_e s_e^m(X^m)q d\Omega \\
&+ \Delta t \int_{\Omega_e} (\lambda_{n_e}(s_e)\widehat{q}_{w_e} - \lambda_{w_e}(s_e)\widehat{q}_{n_e})^{m+1}q d\Omega,
\end{aligned}$$

y la versión espacial discreta de cada término queda expresada como

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_e} \phi_e s_e^{m+1}q d\Omega &= \int_{\Omega_e} \phi_e(\boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\vartheta}^{m+1})(\boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\mu}) d\Omega = \mathbf{M}_{se}^*\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1}\cdot\boldsymbol{\mu}, \\
\int_{\Omega_e} div\mathbf{w}_e^{m+1}q d\Omega &= \int_{\Omega_e} div(\boldsymbol{\phi}^T\boldsymbol{\alpha}_w^{m+1})(\boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\mu}) d\Omega = -\mathbf{L}_e\boldsymbol{\alpha}_{we}^{m+1}\cdot\boldsymbol{\mu}, \\
\int_{\Omega_e} \phi_e s_e^m(X^m)q d\Omega &= \int_{\Omega_e} \phi_e(\boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\vartheta}^m(X^m))(\boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\mu}) d\Omega = \mathbf{M}_{se}^*\boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m)\cdot\boldsymbol{\mu}, \\
&\int_{\Omega_e} (\lambda_{n_e}(s_e)\widehat{q}_{w_e} - \lambda_{w_e}(s_e)\widehat{q}_{n_e})^{m+1}q d\Omega = \\
&\int_{\Omega_e} (\lambda_{n_e}(\boldsymbol{\vartheta}_e)\widehat{q}_{w_e} - \lambda_{w_e}(\boldsymbol{\vartheta}_e)\widehat{q}_{n_e})^{m+1}(\boldsymbol{\zeta}^T\boldsymbol{\mu}) d\Omega = \widehat{\mathbf{q}}_{se}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e)\cdot\boldsymbol{\mu}.
\end{aligned}$$

Entonces, la versión espacial discreta de la segunda ecuación de (MHMBD2) se expresa en la forma

$$\mathbf{L}_e\boldsymbol{\alpha}_{we}^{m+1}\cdot\boldsymbol{\mu} = \left(\mathbf{M}_{se}^* \frac{\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} - \boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m)}{\Delta t} - \widehat{\mathbf{q}}_{se}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \right) \cdot \boldsymbol{\mu}. \quad (3.32)$$

Las condiciones de transmisión del problema (MHMBD1) y su correspondiente aproximación de elemento finito se pueden expresar de la siguiente manera.

$$0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - r_e) d\Gamma,$$

$$\int_{\Gamma_e} \mathbf{u}_e^m \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - r_e) d\Gamma = \int_{\Gamma_e} (\phi_e^T \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \cdot \mathbf{n}) \boldsymbol{\xi}_e^T (\boldsymbol{\nu}_e - \boldsymbol{\pi}_e) d\Gamma = \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \cdot (\boldsymbol{\nu}_e - \boldsymbol{\pi}_e),$$

entonces, la versión espacial discreta de las condiciones de transmisión para (MHMBD1) quedan expresadas como

$$0 \geq \sum_{e=1}^E \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \cdot (\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\pi}_e), \quad \forall \{\boldsymbol{\nu}\} \in \mathbf{Q}_{Nh}^*. \quad (3.33)$$

La versión espacial discreta de las condiciones de transmisión del problema (MHMBD2) y su correspondiente aproximación de elemento finito quedan expresadas por

$$0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{w}_e^{m+1} \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - \rho_e) d\Gamma,$$

$$\int_{\Gamma_e} \mathbf{w}_e^{m+1} \cdot \mathbf{n}_e (\eta_e - \rho_e) d\Gamma = \int_{\Gamma_e} (\phi_e^T \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \cdot \mathbf{n}) \boldsymbol{\xi}_e^T (\boldsymbol{\nu}_e - \boldsymbol{\rho}_e) d\Gamma = \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \cdot (\boldsymbol{\nu}_e - \boldsymbol{\rho}_e),$$

entonces, las condiciones de transmisión para el problema (MHMBD2) en su versión espacial discreta quedan expresadas como

$$0 \geq \sum_{e=1}^E \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \cdot (\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\rho}_e), \quad \forall \{\boldsymbol{\nu}\} \in \mathbf{Q}_{Nh}^*. \quad (3.34)$$

Por lo tanto, con base en las ecuaciones (3.29-3.34), las versiones espaciales discretas de los modelos (MHMBD1) y (MHMBD2), quedan expresadas como

$$(\text{MHMBD1}_h) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\boldsymbol{\alpha}_{u_e}, \boldsymbol{\lambda}_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\hat{\mathbf{u}}_{he}} \times \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\ \text{para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -(\mathbf{L}_e^T \boldsymbol{\lambda}_e^m + \mathbf{T}_e^T \boldsymbol{\pi}_e^m) \cdot \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{A}_{u_e}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m - \mathbf{f}_{u_e}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e)) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0m_{he}}, \\ \mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \cdot \boldsymbol{\mu} = -\hat{\mathbf{q}}_{p_e}^m \cdot \boldsymbol{\mu}, \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\ \text{y } \{\boldsymbol{\pi}_e^m\} : (0, T) \rightarrow \mathbf{Q}_{Nh}^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\ 0 \geq \sum_{e=1}^E \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \cdot (\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\pi}_e^m), \quad \forall \{\boldsymbol{\nu}\} \in \mathbf{Q}_{Nh}^*. \end{array} \right.$$

$$(\text{MHMBD2}_h) \left\{ \begin{array}{l}
\text{Encuentre } (\boldsymbol{\alpha}_{w_e}, \boldsymbol{\vartheta}_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\widehat{\mathbf{w}}_{\mathbf{h}e}} \times \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\
\text{con la condición inicial, } \boldsymbol{\vartheta}_e(x, 0) = \boldsymbol{\vartheta}_{0e}(x), \quad \text{para } e = 1, 2, \dots, E : \\
-(\mathbf{L}_e^T \boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} + \mathbf{T}_e^T \boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}) \cdot \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{A}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} - \mathbf{f}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e)) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0n_{he}}, \\
\mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \cdot \boldsymbol{\mu} = \left(\mathbf{M}_{s_e}^* \frac{\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} - \boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m)}{\Delta t} - \widehat{\mathbf{q}}_{s_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \right) \cdot \boldsymbol{\mu}, \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\
\text{y } \{\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}\} : (0, T) \rightarrow \mathbf{Q}_{N_h}^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\
0 \geq \sum_{e=1}^E \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \cdot (\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}), \quad \forall \{\boldsymbol{\nu}\} \in \mathbf{Q}_{N_h}^*,
\end{array} \right.$$

donde las matrices y vectores locales que aparecen en los modelos (MHMBD1_h) y (MHMBD2_h), están definidas en relación con las funciones base de elemento finito mixto (3.20-3.22), por medio de las relaciones.

Para $i, j = 1, 2, \dots, n_{he}$, $m, k = 1, 2, \dots, m_{he}$, $l = 1, 2, \dots, k_{he}$

$$\left. \begin{array}{l}
L_{e,kj} = - \int_{\Omega_e} \zeta_{e,k} \text{div} \phi_{e,j} \, d\Omega \\
T_{e,lj} = \int_{\Gamma_e} \xi_{e,l} \phi_{e,j} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma \\
A_{w_e,ij}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) = \int_{\Omega_e} \lambda_e^{-m}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \mathbf{K}_e^{-1} \phi_{e,j} \cdot \phi_{e,i} \, d\Omega \\
f_{w_e,j}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) = - \int_{\partial\Omega_{D_e}^p} \widehat{p}_e^m \phi_{e,j} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega + \int_{\Omega_e} (\lambda_{w_e}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) \rho_w + \lambda_{n_e}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) \rho_n) \mathbf{g} \cdot \phi_{e,j} \, d\Omega \\
\widehat{q}_{p_e,k}^m = \int_{\Omega_e^p} \widehat{q}_e^m \zeta_{e,k} \, d\Omega \\
A_{w_e,ij}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) = \int_{\Omega_e} D_e^{-(m+1)}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \mathbf{K}_e^{-1} \phi_{e,j} \cdot \phi_{e,i} \, d\Omega \\
f_{w_e,j}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) = - \int_{\partial\Omega_{D_e}^s} \widehat{s}_e^{m+1} \phi_{e,j} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega + \int_{\Omega_e} \left(\frac{\rho_w - \rho_n}{p'_{c_e}(\boldsymbol{\vartheta}_e)} \right) \mathbf{g} \cdot \phi_{e,j} \, d\Omega \\
M_{s_e,mk}^* = \int_{\Omega_e} \phi_e \zeta_{e,m} \zeta_{e,k} \, d\Omega \\
\widehat{q}_{s_e,k}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) = \int_{\Omega_e} (\lambda_{n_e}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \widehat{q}_{we} - \lambda_{we}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \widehat{q}_{ne})^{m+1} \zeta_{e,k} \, d\Omega
\end{array} \right\} \quad (3.35)$$

Los modelos macrohíbridos mixtos acoplados (MHMB1_h) y (MHMB2_h), constituyen la versión discreta del modelo bifásico de flujo en medios porosos, en términos de los campos (velocidad total-presión global) (\mathbf{u}, p) y (flujo de saturación-saturación) (\mathbf{w}, s) . En el siguiente capítulo, de acuerdo con la metodología adoptada, se abordará el aspecto algorítmico para tratar numéricamente los modelos (MHMBD1_h) y (MHMBD2_h).

Capítulo 4

ALGORITMOS DE PUNTO PRÓXIMO

INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presentan los aspectos teóricos de los algoritmos numéricos de resolución de punto fijo tipo Uzawa, que se aplicarán a los problemas macrohíbridos mixtos planteados en el capítulo anterior. Las bases teóricas de la construcción de estos algoritmos, tienen su origen en la caracterización de desigualdades variacionales en términos de operadores de proximación [42], la cual ha sido fundamental en su desarrollo y construcción.

La metodología propuesta por Gabay [16] y extendida por Alduncin [17] para la aplicación de estos algoritmos a problemas no potenciales, interpretando los procesos iterativos para la aproximación de estados estacionarios de un sistema dinámico como procesos evolutivos en el tiempo, permite que estos sean aplicados como esquemas de integración numérica en el tiempo a problemas evolutivos. Aquí se hace la presentación de algunos de estos algoritmos, y en la última sección de este capítulo, se aplica esta metodología para la resolución numérica del problema de flujo bifásico.

4.1 ALGORITMOS ITERATIVOS PARA DESIGUALDADES VARIACIONALES MIXTAS

Como punto de partida, se considera un problema mixto discreto general y sus problemas primal y dual asociados. Sean V y Y dos espacios reales de dimensión finita, con producto interno. El producto interno y la norma inducida denotados por $(\cdot, \cdot)_V$, $(\cdot, \cdot)_Y$ y $\|\cdot\|_V$, $\|\cdot\|_Y$. Sea $\mathcal{A} : V \rightarrow 2^V$ un operador monótono maximal, en general multivaluado, con dominio $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \{\beta \in V : \mathcal{A}(\beta) \neq \emptyset\}$ y $\Lambda \in \mathcal{L}(V, Y)$. También, sea $G : Y \rightarrow R \cup \{+\infty\}$ un funcional propio, semicontínuo inferiormente y convexo, con dominio efectivo $\mathcal{D}(G) = \{\beta \in Y : G(\beta) < +\infty\}$ y su funcional conjugado $G^* : Y \rightarrow R \cup \{+\infty\}$.

Entonces, como problema mixto general, se considera el siguiente

$$(M) \begin{cases} \text{Encuentre } (\alpha, \lambda^*) \in V \times Y^* : \\ -\Lambda^T \lambda^* \in \mathcal{A}(\alpha), \\ \Lambda \alpha \in \partial G^*(\lambda^*). \end{cases} \quad (4.1)$$

Ahora bien, haciendo uso de los principios de dualidad composicional [39], se puede asociar al problema mixto (M) un problema primal (P), de la siguiente manera. Considerando que se satisface la condición

$$\Lambda \in \mathcal{L}(V, Y) \text{ es sobreyectivo} \quad (4.2)$$

se tiene que

$$\lambda^* \in \partial G(\Lambda\alpha) \Leftrightarrow \Lambda^T \lambda^* \in \partial(G \circ \Lambda)(\alpha) \quad (4.3)$$

y en consecuencia, el correspondiente problema primal (P) asociado al mixto (M), que establecido como

$$(P) \begin{cases} \text{Encuentre } \alpha \in V : \\ 0 \in \mathcal{A}(\alpha) + \partial(G \circ \Lambda)(\alpha). \end{cases} \quad (4.4)$$

De manera análoga, para asociar un problema dual (D) al problema mixto (M), considerando que el operador primal \mathcal{A} es potencial,

$$\mathcal{A} = \partial F \quad (4.5)$$

y se tiene que

$$\mathcal{A}^{-1} = \partial F^* : V^* \rightarrow 2^V \quad (4.6)$$

en el sentido de su gráfica inversa.

Entonces, bajo la condición

$$\Lambda^T \in \mathcal{L}(Y^*, V^*) \text{ es sobreyectivo} \quad (4.7)$$

se tiene la equivalencia

$$\alpha \in \partial F^*(-\Lambda^T \lambda^*) \Leftrightarrow -\Lambda\alpha \in \partial(F^* \circ (-\Lambda^T))(\lambda^*), \quad (4.8)$$

y con base en esto, el problema dual (D) asociado al mixto (M), queda expresado como

$$(D) \begin{cases} \text{Encuentre } \lambda^* \in Y^* : \\ 0 \in \partial G^*(\lambda^*) + \partial(F^* \circ (-\Lambda^T))(\lambda^*). \end{cases} \quad (4.9)$$

La relación que guardan las soluciones de estos problemas se puede expresar de la siguiente manera.

Si (α, λ^*) es solución del problema mixto (M), α es solución del problema primal (P) y λ^* es solución del problema dual (D).

4.2 GENERACIÓN DE LOS ALGORITMOS PRIMAL Y MIXTO TIPO UZAWA

A continuación se describe la forma de generar dos de los primeros algoritmos tipo Uzawa, para la resolución de los problemas (M),(P) y (D).

La estrategia a seguir se basa en la caracterización de un problema de punto fijo en términos de operadores resolventes, para entonces, definir los algoritmos de resolución de punto próximo. Se presentan los algoritmos primal y dual en el contexto de operadores generales monótonos maximales multivaluados, y se identifican como algoritmos tipo Uzawa.

Considérese un parámetro real fijo r , estrictamente positivo

$$r > 0. \quad (4.10)$$

El primer algoritmo que se denotará por ALG0, se formula considerando la versión primal del problema mixto (M),

$$(PM) \begin{cases} \text{Encuentre } (\alpha, \lambda^*) \in V \times Y^* : \\ -\Lambda^T \lambda^* \in \mathcal{A}(\alpha), \\ \Lambda^T \lambda^* \in \partial(G \circ \Lambda)(\alpha), \end{cases} \quad (4.11)$$

donde, la ecuación dual de (4.1) ha sido reemplazada por su ecuación inversa equivalente.

Ahora bien, introduciendo el operador resolvente del subdiferencial $\partial(G \circ \Lambda)$,

$$J_{\partial(G \circ \Lambda)}^r \equiv (I + r\partial(G \circ \Lambda))^{-1}, \quad (4.12)$$

el cual es una contracción univaluada de V , y de hecho, una contracción firme, se tiene la caracterización de un problema de punto fijo de la ecuación (4.11₂),

$$\alpha = J_{\partial(G \circ \Lambda)}^r(\alpha + r\Lambda^T \lambda^*). \quad (4.13)$$

Esta caracterización del operador resolvente de un subdiferencial, también puede ser expresada de la siguiente manera.

Sea W un espacio de Hilbert y $E : W \rightarrow R \cup +\infty$ un funcional convexo, propio y semicontínuo inferiormente. Entonces, el operador resolvente del subdiferencial de E , $J_{\partial E}^r : W \rightarrow W$, está caracterizado por el mapeo de proximación relativo a rE , $\text{Prox}_{rE} : W \rightarrow W$, es decir,

$$J_{\partial E}^r(w) = \text{Prox}_{rE}(w) \equiv \arg \left(\inf_{\nu \in \mathcal{D}(E)} \left\{ \frac{1}{2} \|\nu - w\|_W^2 + rE(\nu) \right\} \right). \quad (4.14)$$

Por definición del operador resolvente, se tiene la equivalencia,

$$u = J_{\partial E}^r(w) \Leftrightarrow 0 \in (u - w) + \partial(rE)(u), \quad (4.15)$$

de la cual se obtiene (4.14)

Combinando las caracterizaciones (4.13) y (4.14), de manera natural asociamos al problema mixto primal (PM) el siguiente algoritmo de punto próximo.

$$(ALG0) \begin{cases} \text{Dado } \alpha^0 \in V, \text{ conocer } \alpha^m, m > 0, \\ \text{calcular } \lambda_m^* \text{ y } \alpha^{m+1} : \\ -\Lambda^T \lambda_m^* \in \mathcal{A}(\alpha^m), \\ \alpha^{m+1} = \text{Prox}_{rG \circ \Lambda}(\alpha^m + r\Lambda^T \lambda_m^*). \end{cases} \quad (4.16)$$

Expresando la ecuación dual (4.11₂) en la forma,

$$0 \in \alpha - (\alpha + r\Lambda^T\lambda^*) + \partial(rG \circ \Lambda)(\alpha), \quad (4.17)$$

se tiene una interpretación directa de la ecuación Euler-Lagrange de un problema de optimización,

$$\alpha = \text{Prox}_{rG \circ \Lambda}(\alpha + r\Lambda^T\lambda^*). \quad (4.18)$$

De esta manera, se ha identificado el algoritmo (ALG0), con un algoritmo Uzawa asociado al problema mixto primal (PM).

Cuando el operador primal monótono maximal \mathcal{A} es univaluado, el algoritmo (ALG0) se reduce a

$$\alpha^{m+1} = \text{Prox}_{rG \circ \Lambda}(\alpha^m - r\mathcal{A}(\alpha^m)), \quad m \geq 0, \quad (4.19)$$

el cual corresponde a un algoritmo Uzawa para el problema primal (P).

En el caso particular cuando $G \circ \Lambda = I_K$, la función indicatriz de un conjunto convexo cerrado $K \subset V$, el mapeo de proximación $\text{Prox}_{rG \circ \Lambda}$ es la proyección sobre K ,

$$\text{Prox}_{rI_K}(\beta) = \text{Proj}_K(\beta) \equiv \arg \left(\inf_{v \in K} \frac{1}{2} \|v - \beta\|_V^2 \right). \quad (4.20)$$

Procediendo en forma análoga, pero ahora para el problema mixto (M), (4.12) está caracterizado por el problema de punto fijo,

$$\lambda^* = J_{\partial G^*}^r(\lambda^* + r\Lambda\alpha). \quad (4.21)$$

Para propósitos de implementación del siguiente algoritmo, se utiliza el siguiente resultado.

Sea $E^* : W \rightarrow R \cup \{+\infty\}$ el funcional conjugado de E . Entonces, el operador de proximación relativo a rE^* está caracterizado por,

$$\text{Prox}_{rE^*} = I - \text{Prox}_{rE \circ (\frac{1}{r})I}. \quad (4.22)$$

Para ver esta equivalencia, se utiliza (4.14), $\text{Prox}_{rE^*} = J_{\partial E^*}^r$ en la siguiente forma.

Sea $u = J_{\partial E^*}^r(w)$. Entonces, $(w - u) \in \partial(rE^*)(u)$ y dualizando se tiene que $w \in (I + \partial(rE^*))^*(w - u)$, de esta manera,

$$J_{\partial E^*}^r = I - (I + \partial(rE^*))^{-1}, \quad (4.23)$$

de donde se obtiene el resultado deseado ya que, $(rE^*)^* = rE \circ (\frac{1}{r})I$.

En consecuencia, se puede asociar al problema mixto (M) el algoritmo de punto próximo,

$$(\text{ALG4}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(G^*), \text{ conocer } \lambda_m^*, m \geq 0, \\ \text{calcular } \alpha^m \text{ y } \lambda_{m+1}^* : \\ -\Lambda^T\lambda_m^* \in \mathcal{A}(\alpha^m), \\ \lambda_{m+1}^* = \left(I - \text{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I} \right) (\lambda_m^* + r\Lambda\alpha^m). \end{array} \right. \quad (4.24)$$

Procediendo como antes, se reescribe (4.12) como,

$$0 \in \lambda^* - (\lambda^* + r\Lambda\alpha) + \partial(rG^*)(\lambda^*), \quad (4.25)$$

que puede identificarse como el problema de Euler-Lagrange de un problema de optimización,

$$\lambda^* = \text{Prox}_{rG^*}(\lambda^* + \Lambda\alpha). \quad (4.26)$$

De esta manera se puede ver que el algoritmo (ALG4) corresponde al algoritmo Uzawa asociado al problema mixto (M). En el caso particular, cuando Λ es la identidad, el algoritmo (ALG4) se reduce a,

$$\begin{cases} \mathcal{A}(\alpha^m) + \lambda_m^* = 0, \\ \lambda_{m+1}^* = (I - \text{Proj}_{rK})(\lambda_m^* + r\alpha^m). \end{cases} \quad (4.27)$$

Se describen a continuación tres algoritmos tipo dualidad-penalización (ALG1, ALG2 y ALG3), para la resolución numérica del problema dual (D). Para estos casos, los algoritmos pueden ser construidos de las aproximaciones de punto próximo asociadas a las siguientes tres caracterizaciones del operador resolvente de la ecuación dual (4.11).

$$\lambda^* = J_{\mathcal{A}_\Lambda^* + \partial G^*}^r(\lambda^*), \quad (4.28)$$

$$\lambda^* = J_{\mathcal{A}_\Lambda^*}^r(s^*), \quad s^* = J_{\partial G^*}^r(2\lambda^* - s^*) + (s^* - \lambda^*), \quad (4.29)$$

$$\lambda^* = J_{\mathcal{A}_\Lambda^*}^r(s^*), \quad s^* = (2J_{\partial G^*}^r - I)(2\lambda^* - s^*), \quad (4.30)$$

donde, \mathcal{A}_Λ^* es el mapeo dual relativo a Λ , $\mathcal{A}_\Lambda^* : Y \rightarrow 2^Y$, para $\mu^* \in Y$

$$\mathcal{A}_\Lambda^*(\mu^*) \equiv \{\nu^* \in Y : \exists \beta \in V, \nu^* = -\Lambda\beta, -\Lambda^T \mu^* \in \mathcal{A}(\beta)\}. \quad (4.31)$$

El algoritmo (ALG1) se obtiene de la interpretación del algoritmo de punto próximo de (4.28).

$$\begin{cases} \lambda_m^* - \lambda_{m+1}^* = -r(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1}), \\ -\Lambda^T \lambda_{m+1}^* \in \mathcal{A}(\alpha^{m+1}), \\ p^{m+1} \in \partial G^*(\lambda_{m+1}^*). \end{cases} \quad (4.32)$$

Entonces, invirtiendo (4.32) y sustituyendo se obtiene,

$$(\text{ALG1}) \begin{cases} \text{Dado } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\Lambda^*) \cap \mathcal{D}(G^*), \text{ conocer } \lambda_m^*, m \geq 0, \\ \text{calcular } p^{m+1}, \alpha^{m+1} \text{ y } \lambda_{m+1}^* : \\ \lambda_m^* + r(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1}) \in \partial G(p^{m+1}), \\ -\Lambda^T(\lambda_{m+1}^* + r(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1})) \in \mathcal{A}(\alpha^{m+1}), \\ \lambda_{m+1}^* = \lambda_m^* + r(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1}). \end{cases} \quad (4.33)$$

El algoritmo (ALG1), es una extensión del algoritmo de dualidad-penalización del método de lagrangianos aumentados para problemas potenciales, al caso de desigualdades variacionales no necesariamente potenciales.

Los dos siguientes algoritmos pueden ser vistos como aplicaciones del método de división de operadores de Lions y Mercier [19] al problema dual (D).

De la caracterización (4.29) y su algoritmo de punto próximo asociado,

$$\lambda_{m+1}^* = J_{\mathcal{A}_\Lambda^*}^r(s_m^*), \quad s_m^* = J_{\partial G^*}^r(2\lambda_m^* - s_{m-1}^*) + (s_{m-1}^* - \lambda_m^*), \quad (4.34)$$

e introduciendo las relaciones,

$$-r\Lambda\alpha^{m+1} = s_m^* - \lambda_{m+1}^*, \quad rp^{m+1} = \lambda_m^* - s_m^*, \quad (4.35)$$

por eliminación de s_{m-1}^* , se obtiene el siguiente algoritmo tipo dualidad-penalización.

$$(\text{ALG2}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \alpha^0 \in V \text{ y } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\Lambda^*) \cap \mathcal{D}(G^*), \text{ conocer } \alpha^m \text{ y } \lambda_m^*, \quad m \geq 0, \\ \text{calcular } p^{m+1}, \alpha^{m+1} \text{ y } \lambda_{m+1}^* : \\ \lambda_m^* + r(\Lambda\alpha^m - p^{m+1}) \in \partial G(p^{m+1}), \\ -\Lambda^T(\lambda_m^* + r(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1})) \in \mathcal{A}(\alpha^{m+1}), \\ \lambda_{m+1}^* = \lambda_m^* + r(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1}). \end{array} \right. \quad (4.36)$$

Para la derivación de (ALG3), se introduce en (ALG2) una actualización intermedia del multiplicador λ^* , y se asocia a la tercer caracterización de la ecuación dual (4.30) el algoritmo de punto próximo,

$$\lambda_{m+1}^* = J_{\mathcal{A}_\Lambda^*}^r(s_m^*), \quad s_m^* = (2J_{\partial G^*}^r - I)(2\lambda_m^* - s_{m-1}^*) \quad (4.37)$$

bajo las relaciones

$$\left\{ \begin{array}{l} -r\Lambda\alpha^{m+1} = s_m^* - \lambda_{m+1}^*, \\ \lambda_{m+\frac{1}{2}}^* = \lambda_m^* + \frac{1}{2}s_m^* - \frac{1}{2}s_{m-1}^*, \\ rp^{m+1} = 2\lambda_m^* - \lambda_{m+\frac{1}{2}}^* - s_{m-1}^*, \end{array} \right. \quad (4.38)$$

se obtiene el algoritmo (ALG3), como una segunda versión del algoritmo (ALG1),

$$(\text{ALG3}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \alpha^0 \in V \text{ y } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\Lambda^*) \cap \mathcal{D}(G^*), \text{ conocer } \alpha^m \text{ y } \lambda_m^*, \quad m \geq 0, \\ \text{calcular } p^{m+1}, \lambda_{m+\frac{1}{2}}^*, \alpha^{m+1} \text{ y } \lambda_{m+1}^* : \\ \lambda_m^* + r(\Lambda\alpha^m - p^{m+1}) \in \partial G(p^{m+1}), \\ \lambda_{m+\frac{1}{2}}^* = \lambda_m^* + r(\Lambda\alpha^m - p^{m+1}), \\ -\Lambda^T(\lambda_{m+\frac{1}{2}}^* + r(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1})) \in \mathcal{A}(\alpha^{m+1}), \\ \lambda_{m+1}^* = \lambda_{m+\frac{1}{2}}^* + r(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1}). \end{array} \right. \quad (4.39)$$

Para concluir esta sección, se presenta la relación que existe entre los algoritmos (ALG2) y (ALG3) con aquellos estudiados por Lions y Mercier [19], de acuerdo con Alduncin [17].

Por eliminación de λ_{m+1}^* en el algoritmo (4.34) se obtiene la relación,

$$s_{m+1}^* = J_{\partial G^*}^r (2J_{\mathcal{A}_\lambda^*}^r - I)(s_m^*) + (I - J_{\mathcal{A}_\lambda^*}^r)(s_m^*). \quad (4.40)$$

De manera análoga, la eliminación de λ_{m+1}^* en el algoritmo (4.37), conduce al proceso iterativo,

$$s_{m+1}^* = (2J_{\partial G^*}^r - I)(2J_{\mathcal{A}_\lambda^*}^r - I)(s_m^*). \quad (4.41)$$

Las expresiones (4.40) y (4.41), corresponden a los algoritmos II y I respectivamente de Lions-Mercier [19].

4.3 METODOS DE RESOLVENTES Y ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN NUMÉRICA EN EL TIEMPO

La importancia que tienen los algoritmos presentados en la sección anterior, es que, ellos pueden ser identificados como esquemas de discretización numérica en el tiempo de los correspondientes problemas evolutivos. Se presenta a continuación, siguiendo el trabajo de Alduncin [17], cómo, los diversos algoritmos iterativos pueden ser interpretados como procesos evolutivos en el tiempo para un sistema dinámico, que va de un estado inicial hacia un estado estacionario.

En primer lugar se considera un problema evolutivo primal, identificando (ALG0) como un algoritmo preconditionado relativo al esquema semi-implícito de Euler de integración numérica en el tiempo. A continuación, se considera un problema evolutivo dual, relacionando su esquema semi-implícito de Euler con (ALG4) como una aproximación preconditionada. El correspondiente esquema implícito de Euler está relacionado a una versión preconditionada del algoritmo (ALG1). Los algoritmos (ALG2) y (ALG3) son identificados como aproximaciones preconditionadas relativas a los esquemas de Douglas-Rachford y Peaceman-Rachford, respectivamente.

Para considerar sistemas dinámicos con una matriz de "masa" general "el preconditionador", se establece lo siguiente.

Bajo la misma notación de (4.18) y (4.22), sea R un isomorfismo simétrico y positivo definido sobre el espacio de Hilbert W , y sea $\|\cdot\|_R$ la norma- W inducida por el producto interno $(R, \cdot)_W$. Entonces, el R -resolvente del subdiferencial ∂E , definido por,

$$J_{R, \partial E}^r \equiv (R + r\partial E)^{-1}, \quad (4.42)$$

está caracterizado por el mapeo de proximación- R relativo a rE , $\text{Prox}_{R, rE}$, para $w \in W$, en la forma

$$J_{R, \partial E}^r \circ R(w) = \text{Prox}_{R, rE}(w) \equiv \arg \left(\inf_{v \in \mathcal{D}(E)} \left\{ \frac{1}{2} \|v - w\|_R^2 + rE(v) \right\} \right). \quad (4.43)$$

También, el mapeo de proximación- R relativo a rE^* está caracterizado por,

$$\text{Prox}_{R, rE^*} = I - R^{-1} \circ \text{Prox}_{R^{-1}, rE \circ (1/r)I} \circ R. \quad (4.44)$$

De la definición (4.42),

$$u = J_{R, \partial E}^r(Rw) \Leftrightarrow 0 \in R(u - w) + \partial(rE)(u), \quad (4.45)$$

por integración de la ecuación anterior, se obtiene (4.43). Ahora bien, como $\text{Prox}_{R, rE^*} = J_{R, \partial E^*}^r \circ R$, considerando que $u = J_{R, \partial E^*}^r(Rw)$, se tiene que $R(w - u) \in \partial(rE^*)(u)$, y por dualización se tiene, $w \in (R^{-1} + \partial(rE^*)) \circ R(w - u)$. De esta manera,

$$J_{R, \partial E^*}^r \circ R = I - R^{-1} \left(R^{-1} + \partial(rE^*) \right)^{-1} \circ R^{-1}, \quad (4.46)$$

de donde se obtiene (4.44), ya que $(rE^*)^* = rE \circ (1/r)I$.

4.4 ESQUEMA SEMI-IMPLÍCITO DE EULER PARA EL PROBLEMA MIXTO EVOLUTIVO PRIMAL

Considérese el problema mixto evolutivo primal asociado al problema mixto (M), para $t \in (0, +\infty)$,

$$(\text{PEM}) \begin{cases} \text{Encuentre } (\alpha(t), \lambda^*(t)) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) \times \mathcal{D}(G^*(t)) : \\ -\Lambda^T \lambda^*(t) \in M \frac{d\alpha}{dt}(t) + \mathcal{A}(t; \alpha(t)), \\ \Lambda \alpha(t) \in \partial G^*(t; \alpha(t)), \\ \alpha(0) = \alpha^0, \end{cases} \quad (4.47)$$

donde, $M : V \rightarrow V$ denota la matriz de "masa" simétrica y positiva definida del sistema discreto y $\alpha^0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(0)) \cap \mathcal{D}(G(0) \circ \Lambda)$ es el estado primal inicial.

Procediendo de la misma manera como se obtuvo (4.4), se puede identificar el problema (PEM) como el problema mixto de un problema evolutivo primal asociado al problema primal (P).

Para $t \in (0, +\infty)$, sea $(\alpha(t), \lambda^*(t)) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) \times \mathcal{D}(G^*(t))$ una solución del problema mixto evolutivo primal (PEM). Entonces, α es una solución del problema evolutivo primal,

$$(\text{EP}) \begin{cases} \text{Encuentre } \alpha(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) \cap \mathcal{D}(G(t) \circ \Lambda) : \\ 0 \in M \frac{d\alpha}{dt}(t) + \mathcal{A}(t; \alpha(t)) + \partial(G(t) \circ \Lambda)(\alpha(t)), \\ \alpha(0) = \alpha^0. \end{cases} \quad (4.48)$$

Recíprocamente, si $\alpha(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) \cap \mathcal{D}(G(t) \circ \Lambda)$ es una solución del problema evolutivo primal (EP), entonces $\exists \lambda^*(t) \in \mathcal{D}(G^*(t))$ tal que,

$$\lambda^*(t) \in \partial G(t; \Lambda \alpha(t)), \quad (4.49)$$

y (α, λ^*) es una solución del problema mixto evolutivo primal (PEM).

Para el problema (EP) considerando como método de discretización temporal, el esquema primal semi-implícito de Euler, se tiene

$$0 \in M(\alpha^{m+1} - \alpha^m)/r + \mathcal{A}^m(\alpha^m) + \partial(G^{m+1} \circ \Lambda)(\alpha^{m+1}), \quad (4.50)$$

donde, como es usual, r corresponde al paso de tiempo y el superíndice m denota los valores del campo al tiempo $t_m = mr$.

El esquema semi-implícito de Euler del problema (EP) (4.50), tiene la siguiente versión preconditionada del algoritmo (ALG0).

$$(\text{ALG0}_M) \begin{cases} \text{Dado } \alpha^0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^0) \cap \mathcal{D}(G^0 \circ \Lambda), \text{ conocer } \alpha^m, m \geq 0, \\ \text{calcular } \lambda_m^* \text{ y } \alpha^{m+1} : \\ -\Lambda^T \lambda_m^* \in \mathcal{A}^m(\alpha^m), \\ \alpha^{m+1} = \text{Prox}_{M, rG^{m+1} \circ \Lambda}(\alpha^m + rM^{-1}\Lambda^T \lambda_m^*), \end{cases} \quad (4.51)$$

donde, $\text{Prox}_{M, rG^{m+1} \circ \Lambda}$ es el mapeo de proximación- M relativo a $rG^{m+1} \circ \Lambda$.

Este algoritmo se puede obtener considerando (4.51₁) como una definición, y en consecuencia, el esquema (4.50) toma la forma,

$$\alpha^{m+1} = J_{M, \partial(G^{m+1} \circ \Lambda)}^r(M\alpha^m + r\Lambda^T \lambda_m^*), \quad (4.52)$$

donde, $J_{M, \partial(G^{m+1} \circ \Lambda)}^r$ es el M -resolvente de $\partial(G^{m+1} \circ \Lambda)$ que, de acuerdo con (4.42), se puede expresar como,

$$J_{M, \partial(G^{m+1} \circ \Lambda)}^r \circ M = \text{Prox}_{M, rG^{m+1} \circ \Lambda}, \quad (4.53)$$

de donde se obtiene el algoritmo (4.51).

Para relacionar las secuencias convergentes del algoritmo (ALG0_M) con las soluciones estacionarias, de (4.53) se reescribe (4.51) en la forma

$$-\Lambda^T \lambda_m^* \in \mathcal{A}^m(\alpha^m), \quad (M\alpha^m + r\Lambda^T \lambda_m^*) \in (M + r\partial(G^{m+1} \circ \Lambda))(\alpha^{m+1}), \quad (4.54)$$

de donde se puede concluir que (ALG0_M) tiene la interpretación de ser un algoritmo iterativo para la versión preconditionada del problema (PM),

$$-\Lambda^T \lambda^* \in \mathcal{A}(\alpha), \quad (M\alpha + r\Lambda^T \lambda^*) \in (M + r\partial(G \circ \Lambda))(\alpha). \quad (4.55)$$

Por lo tanto, las secuencias convergentes del algoritmo (ALG0_M) tienen como estados estacionarios límites, las soluciones del problema mixto (M).

4.5 ESQUEMAS DE EULER EL PROBLEMA MIXTO EVOLUTIVO DUAL

Considerando el problema mixto evolutivo dual asociado al problema mixto (M), para $t \in (0, +\infty)$,

$$(\text{DEM}) \begin{cases} \text{Encuentre } (\alpha(t), \lambda^*(t)) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) \times \mathcal{D}(G^*(t)) : \\ -\Lambda^T \lambda^*(t) \in \mathcal{A}(t; \alpha(t)), \\ \Lambda \alpha(t) \in M^* \frac{d\lambda^*}{dt}(t) + \partial G^*(t; \lambda^*(t)), \\ \lambda^*(0) = \lambda_0^*, \end{cases} \quad (4.56)$$

con la matriz de "masa dual" simétrica y positiva definida $M^* : Y \rightarrow Y$, cuya inversa es denotada por M^{-*} , y el estado inicial dual $\lambda_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\Lambda^*(0)) \cap \mathcal{D}(G^*(0))$, se puede identificar el problema (DEM) como el problema mixto evolutivo dual asociado al problema dual (D).

Para esto, considérese $t \in (0, +\infty)$, y sea $(\alpha(t), \lambda^*(t)) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t)) \times \mathcal{D}(G^*(t))$ una solución del problema mixto evolutivo dual (DEM). Entonces, λ^* es una solución del problema evolutivo dual,

$$(ED) \begin{cases} \text{Encuentre } \lambda^*(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\Lambda^*(t)) \cap \mathcal{D}(G^*(t)) : \\ 0 \in M^* \frac{d\lambda^*}{dt}(t) + \mathcal{A}_\Lambda^*(t; \lambda^*(t)) + \partial G^*(t; \lambda^*(t)), \\ \lambda^*(0) = \lambda_0^*. \end{cases} \quad (4.57)$$

Recíprocamente, si $\lambda^*(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\Lambda^*(t)) \cap \mathcal{D}(G^*(t))$ es una solución del problema evolutivo dual (ED), entonces $\exists \alpha(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}(t))$ tal que,

$$-\Lambda \alpha(t) \in \mathcal{A}_\Lambda^*(t; \lambda^*(t)), \quad (4.58)$$

y (α, λ^*) es una solución del problema mixto evolutivo dual (DEM).

Para el problema (ED) se consideran los métodos.

El esquema dual semi-implícito de Euler,

$$0 \in M^*(\lambda_{m+1}^* - \lambda_m^*)/r + \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\lambda_m^*) + \partial G_{m+1}^*(\lambda_{m+1}^*). \quad (4.59)$$

El esquema dual implícito de Euler,

$$0 \in M^*(\lambda_{m+1}^* - \lambda_m^*)/r + \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^*(\lambda_{m+1}^*) + \partial G_{m+1}^*(\lambda_{m+1}^*). \quad (4.60)$$

El esquema semi-implícito de Euler del problema (ED) (4.59), puede ser identificado con la versión preconditionada del algoritmo (ALG4),

$$(ALG4_{M^*}) \begin{cases} \text{Dado } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(G_0^*), \text{ conocer } \lambda_m^*, m \geq 0, \\ \text{calcular } \alpha^m \text{ y } \lambda_{m+1}^* : \\ -\Lambda^T \lambda_m^* \in \mathcal{A}^m(\alpha^m), \\ \lambda_{m+1}^* = \left(I - M^{-*} \text{Prox}_{M^{-*}, rG^{m+1} \circ (1/r)I} \right) (\lambda_m^* + rM^{-*} \Lambda \alpha^m). \end{cases} \quad (4.61)$$

El esquema implícito de Euler (4.60), con la versión preconditionada del algoritmo (ALG1),

$$(ALG1_{M^*}) \begin{cases} \text{Dado } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_{\Lambda_0}^*) \cap \mathcal{D}(G_0^*), \text{ conocer } \lambda_m^*, m \geq 0, \\ \text{calcular } p^{m+1}, \alpha^{m+1} \text{ y } \lambda_{m+1}^* : \\ \lambda_m^* + rM^{-*}(\Lambda \alpha^{m+1} - p^{m+1}) \in \partial G^{m+1}(p^{m+1}), \\ -\Lambda^T(\lambda_m^* + rM^{-*}(\Lambda \alpha^{m+1} - p^{m+1})) \in \mathcal{A}^{m+1}(\alpha^{m+1}), \\ \lambda_{m+1}^* = \lambda_m^* + rM^{-*}(\Lambda \alpha^{m+1} - p^{m+1}). \end{cases} \quad (4.62)$$

Considerando la ecuación dual de (4.61) como una definición, el esquema (4.59) puede ser expresado en términos del M^* -resolvente de ∂G_{m+1}^* como,

$$-\Lambda\alpha^m \in \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\lambda_m^*), \quad \lambda_{m+1}^* = J_{M^*, \partial G_{m+1}^*}^r(M^*\lambda_m^* + r\Lambda\alpha^m). \quad (4.63)$$

Entonces, de acuerdo con (4.42) se obtiene de la caracterización siguiente,

$$J_{M^*, \partial G_{m+1}^*}^r \circ M^* = \text{Prox}_{M^*, rG_{m+1}^*} = I - M^{-*} \text{Prox}_{M^{-*}, rG^{m+1} \circ (1/r)I}. \quad (4.64)$$

De manera análoga, expresando el esquema implícito (4.60) en la forma,

$$\begin{cases} 0 = M^*(\lambda_{m+1}^* - \lambda_m^*)/r - \Lambda\alpha^{m+1} + p^{m+1}, \\ -\Lambda\alpha^{m+1} \in \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^*(\lambda_{m+1}^*), \\ p^{m+1} \in \partial G_{m+1}^*(\lambda_{m+1}^*), \end{cases} \quad (4.65)$$

se obtiene el algoritmo (4.62), por dualización de (4.65_{2,3}).

Con respecto de las secuencias convergentes de estos algoritmos, se observa de (4.64) que, la ecuación (4.61₂) tiene la interpretación,

$$M^*\lambda_m^* + r\Lambda\alpha^m \in (M^* + r\partial G_{m+1}^*)(\lambda_{m+1}^*), \quad (4.66)$$

y consecuentemente, el algoritmo (ALG4 $_{M^*}$) puede ser considerado como un proceso de aproximación para la versión preconditionada del problema estacionario (M),

$$-\Lambda^T\lambda^* \in \mathcal{A}(\alpha), \quad M^*\lambda^* + r\Lambda\alpha \in (M^* + r\partial G^*)(\lambda^*). \quad (4.67)$$

Debe observarse también que, los estados límites del algoritmo (ALG4 $_{M^*}$) que necesariamente son estados estacionarios mixtos, son soluciones del problema (M).

Por otra parte, de (4.65), se sigue que las secuencias duales λ_{m+1}^* generadas por el algoritmo (ALG1 $_{M^*}$), satisfacen el algoritmo dual de punto próximo,

$$M^*\lambda_m^* \in (M^* + r\mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^* + r\partial G_{m+1}^*)(\lambda_{m+1}^*), \quad (4.68)$$

el cual a su vez, aproxima la versión preconditionada del problema (D),

$$M^*\lambda^* \in (M^* + r\mathcal{A}_{\Lambda}^* + r\partial G^*)(\lambda^*). \quad (4.69)$$

Por lo tanto, las secuencias convergentes λ_{m+1}^* de (ALG1 $_{M^*}$) que necesariamente convergen a estados estacionarios, son soluciones del problema dual (D).

4.6 ESQUEMAS DE DIVISIÓN DE OPERADORES PARA EL PROBLEMA MIXTO EVOLUTIVO DUAL

En esta sección se considera el método de división de operadores para tratar el problema evolutivo dual (ED). Los esquemas son.

El esquema de Douglas-Rachford,

$$\begin{cases} 0 \in M^*(\tilde{\lambda}_{m+1}^* - \lambda_m^*)/r + \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\lambda_m^*) + \partial G_{m+1}^*(\tilde{\lambda}_{m+1}^*), \\ 0 \in M^*(\lambda_{m+1}^* - \lambda_m^*)/r + \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^*(\lambda_{m+1}^*) + \partial G_{m+1}^*(\tilde{\lambda}_{m+1}^*). \end{cases} \quad (4.70)$$

El esquema Peaceman-Rachford,

$$\begin{cases} 0 \in M^*(\lambda_{m+1/2}^* - \lambda_m^*)/(r/2) + \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\lambda_m^*) + \partial G_{m+1/2}^*(\lambda_{m+1/2}^*), \\ 0 \in M^*(\lambda_{m+1}^* - \lambda_{m+1/2}^*)/(r/2) + \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^*(\lambda_{m+1}^*) + \partial G_{m+1/2}^*(\lambda_{m+1/2}^*). \end{cases} \quad (4.71)$$

El esquema Douglas-Rachford del problema (ED) (4.70), tiene la siguiente interpretación como una versión preconditionada del algoritmo (ALG2):

$$(ALG2_{M^*}) \begin{cases} \text{Dado } \alpha^0 \in V \text{ y } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_{\Lambda_0}^*) \cap \mathcal{D}(G_0^*), \text{ conocer } \alpha^m \text{ y } \lambda_m^*, \quad m \geq 0, \\ \text{calcular } p^{m+1}, \alpha^{m+1} \text{ y } \lambda_{m+1}^* : \\ \lambda_m^* + rM^{-*}(\Lambda\alpha^m - p^{m+1}) \in \partial G^{m+1}(p^{m+1}), \\ -\Lambda^T(\lambda_m^* + rM^{-*}(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1})) \in \mathcal{A}^{m+1}(\alpha^{m+1}), \\ \lambda_{m+1}^* = \lambda_m^* + rM^{-*}(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1}); \end{cases} \quad (4.72)$$

y el esquema de Peaceman-Rachford, (4.71), tiene la siguiente interpretación del algoritmo (ALG3):

$$(ALG3_{M^*}) \begin{cases} \text{Dado } \alpha^0 \in V \text{ y } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_{\Lambda_0}^*) \cap \mathcal{D}(G_0^*), \text{ conocer } \alpha^m \text{ y } \lambda_m^*, \quad m \geq 0, \\ \text{calcular } p^{m+1}, \lambda_{m+1/2}^*, \alpha^{m+1} \text{ y } \lambda_{m+1}^* : \\ \lambda_m^* + (r/2)M^{-*}(\Lambda\alpha^m - p^{m+1}) \in \partial G^{m+1/2}(p^{m+1}), \\ \lambda_{m+1/2}^* = \lambda_m^* + (r/2)M^{-*}(\Lambda\alpha^m - p^{m+1}), \\ -\Lambda^T(\lambda_{m+1/2}^* + (r/2)M^{-*}(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1})) \in \mathcal{A}^{m+1}(\alpha^{m+1}), \\ \lambda_{m+1}^* = \lambda_{m+1/2}^* + (r/2)M^{-*}(\Lambda\alpha^{m+1} - p^{m+1}). \end{cases} \quad (4.73)$$

Para obtener (ALG2_{M*}), se expresa el esquema (4.70) en la forma,

$$\begin{cases} 0 \in M^*(\tilde{\lambda}_{m+1}^* - \lambda_m^*)/r - \Lambda\alpha^m + p^{m+1}, \\ -\Lambda\alpha^m \in \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\lambda_m^*), \\ p^{m+1} \in \partial G_{m+1}^*(\tilde{\lambda}_{m+1}^*), \\ -\Lambda\alpha^{m+1} \in \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^*(\lambda_{m+1}^*), \\ 0 \in M^*(\lambda_{m+1}^* - \lambda_m^*)/r - \Lambda\alpha^{m+1} + p^{m+1}, \end{cases} \quad (4.74)$$

de donde se obtiene el algoritmo (4.72) por dualización. De manera similar, el algoritmo (4.73) se obtiene expresando (4.71) en la forma,

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 \in M^*(\lambda_{m+1/2}^* - \lambda_m^*)/(r/2) - \Lambda\alpha^m + p^{m+1}, \\ -\Lambda\alpha^m \in \mathcal{A}_{\Lambda_m}^*(\lambda_m^*), \\ p^{m+1} \in \partial G_{m+1/2}^*(\lambda_{m+1/2}^*), \\ -\Lambda\alpha^{m+1} \in \mathcal{A}_{\Lambda_{m+1}}^*(\lambda_{m+1}^*), \\ 0 \in M^*(\lambda_{m+1}^* - \lambda_{m+1/2}^*)/(r/2) - \Lambda\alpha^{m+1} + p^{m+1}. \end{array} \right. \quad (4.75)$$

Procediendo como antes, introduciendo en (4.74) la versión preconditionada de las relaciones (4.35),

$$-rM^{-*}\Lambda\alpha^{m+1} = s_m^* - \lambda_{m+1}^*, \quad rM^{-*}p^{m+1} = \lambda_m^* - s_m^* \quad (4.76)$$

se llega a la interpretación del algoritmo (ALG2 M^*),

$$\begin{aligned} M^*s_m^* &\in (M^* + r\mathcal{A}_{\Lambda_m}^*)(\lambda_{m+1}^*), \\ M^*(2\lambda_m^* - s_{m-1}^*) &\in (M^* + r\partial G_{m+1}^*)(\lambda_m^* + s_m^* - s_{m-1}^*). \end{aligned} \quad (4.77)$$

Esta es una aproximación de punto próximo de la versión preconditionada del problema dual (D),

$$2M^*\lambda^* \in (M^* + r\mathcal{A}_{\Lambda}^*)(\lambda^*) + (M^* + r\partial G^*)(\lambda^*). \quad (4.78)$$

De manera análoga, introduciendo en (4.75) la versión de (4.38),

$$\left\{ \begin{array}{l} -(r/2)M^{-*}\Lambda\alpha^{m+1} = s_m^* - \lambda_{m+1}^*, \\ \lambda_{m+1/2}^* = \lambda_m^* + \frac{1}{2}s_m^* - \frac{1}{2}s_{m-1}^*, \\ (r/2)M^{-*}p^{m+1} = 2\lambda_m^* - \lambda_{m+1/2}^* - s_{m-1}^*, \end{array} \right. \quad (4.79)$$

se tiene la interpretación del algoritmo (ALG3 M^*),

$$\left\{ \begin{array}{l} M^*s_m^* \in (M^* + (r/2)\mathcal{A}_{\Lambda_m}^*)(\lambda_{m+1}^*), \\ M^*(2\lambda_m^* - s_{m-1}^*) \in (M^* + (r/2)\partial G_{m+1/2}^*)(\lambda_m^* + \frac{1}{2}s_m^* - \frac{1}{2}s_{m-1}^*), \end{array} \right. \quad (4.80)$$

la cual es otra aproximación de punto próximo de la versión preconditionada del problema dual (D), (4.78), con r reemplazado por $r/2$.

Por último, los límites de las secuencias convergentes λ_{m+1}^* de los algoritmos (ALG2 M^*) y (ALG3 M^*) que necesariamente son estados estacionarios, son soluciones del problema dual (D).

4.7 ALGORITMOS DE PUNTO PRÓXIMO EN PARALELO

En esta sección se hará uso de la teoría presentada en las secciones anteriores, con el propósito de generar los algoritmos necesarios para resolver el problema de flujo bifásico. Se identificará cada uno de los problemas que constituyen el modelo discreto bifásico, con un modelo mixto abstracto y se hará explícita su versión aumentada para finalmente, obtener los algoritmos iterativos de cada componente del modelo bifásico.

El punto de partida es el modelo discreto (MHMBD1_h) para la componente (\mathbf{u}_e, p_e) planteado en la última sección del capítulo anterior,

$$(\text{MHMBD1}_h) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\boldsymbol{\alpha}_{u_e}, \boldsymbol{\lambda}_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\widehat{\mathbf{u}}_{he}} \times \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\ \text{para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -(\mathbf{L}_e^T \boldsymbol{\lambda}_e^m + \mathbf{T}_e^T \boldsymbol{\pi}_e^m) \cdot \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{A}_{u_e}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m - \mathbf{f}_{u_e}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e)) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0n_{he}}, \\ \mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \cdot \boldsymbol{\mu} = -\widehat{\mathbf{q}}_{pe}^m \cdot \boldsymbol{\mu}, \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\ \text{y } \{\boldsymbol{\pi}_e^m\} : (0, T) \rightarrow \mathbf{Q}_{N_h}^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\ 0 \geq \sum_{e=1}^E \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \cdot (\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\pi}_e^m), \quad \forall \{\boldsymbol{\nu}\} \in \mathbf{Q}_{N_h}^*. \end{array} \right.$$

La formulación subdiferencial de (MHMBD1_h), para el componente velocidad total-presión global (\mathbf{u}_e, p_e), se puede expresar de forma general como el modelo mixto abstracto,

$$(\mathbf{M}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}^*) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \times \mathcal{D}(\partial \mathbf{G}^*) : \\ -\boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\lambda}^* \in \mathcal{A}(\boldsymbol{\alpha}), \\ \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha} \in \partial \mathbf{G}^*(\boldsymbol{\lambda}^*), \end{array} \right.$$

haciendo la identificación de los vectores primales y duales,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha} &\simeq \{ \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \} \in \mathbf{V} = \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\ \boldsymbol{\lambda}^* &\simeq (\{ \boldsymbol{\lambda}_e^m \}, \{ \boldsymbol{\pi}_e^m \}) \in \mathbf{Y} = \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}} \times \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{k_{he}}, \end{aligned} \tag{4.81}$$

bajo las relaciones operacionales,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\boldsymbol{\alpha}) &\simeq \{ \mathbf{A}_{u_e}^m \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m - \mathbf{f}_{u_e}^m + \partial \mathbf{I}_{\mathbf{K}_{\widehat{\mathbf{u}}_{n_{he}}}} \}, \\ \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha} &\simeq (\{ \mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \}, \{ \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m \}), \\ \boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\lambda}^* &\simeq \{ \mathbf{L}_e^T \boldsymbol{\lambda}_e^m + \mathbf{T}_e^T \boldsymbol{\pi}_e^m \}, \\ \partial \mathbf{G}^*(\boldsymbol{\lambda}^*) &\simeq (-\{ \widehat{\mathbf{q}}_{pe}^m \}, \partial \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{N_h}^*}(\{ \boldsymbol{\pi}_e^m \})). \end{aligned} \tag{4.82}$$

Aquí, el operador primal $\mathcal{A} : \mathbf{V} \rightarrow 2^{\mathbf{V}}$ es un operador monótono maximal con dominio $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \{ \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{V} : \mathcal{A}(\boldsymbol{\beta}) \neq \emptyset \} = \mathbf{K}_{\widehat{\mathbf{u}}_{n_{he}}}$, $\boldsymbol{\Lambda} \in \mathcal{L}(\mathbf{V}, \mathbf{Y})$ es un operador lineal con transpuesto $\boldsymbol{\Lambda}^T \in \mathcal{L}(\mathbf{Y}, \mathbf{V})$, y $\partial \mathbf{G}^* : \mathbf{Y} \rightarrow 2^{\mathbf{Y}}$ es un subdiferencial monótono con dominio efectivo $\mathcal{D}(\mathbf{G}^*) = \{ \boldsymbol{\nu} \in \mathbf{Y} : \mathbf{G}^*(\boldsymbol{\nu}^*) < +\infty \} = \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}} \times \mathbf{Q}_{N_h}^*$.

A continuación, se construye un algoritmo de punto próximo con base en el problema mixto abstracto (M). Para ello, se reformula este problema en la forma aumentada de proximación de dos campos.

Sea

$$r > 0 \quad (4.83)$$

un parámetro real fijo. Entonces, escribiendo la ecuación dual de (\mathbf{M}) en la forma equivalente,

$$\boldsymbol{\lambda}^* + r\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha} \in (\mathbf{I} + r\partial G^*)(\boldsymbol{\lambda}^*), \quad (4.84)$$

e introduciendo el operador resolvente del subdiferencial ∂G^* , definido y caracterizado por

$$\mathbf{J}_{\partial G^*}^r \equiv \mathbf{Prox}_{rG^*} = \mathbf{I} - \mathbf{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I}, \quad (4.85)$$

donde, $\mathbf{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I}$ es el operador de proximación relativo al superpotencial primal $rG \circ (\frac{1}{r})I : \mathbf{Y} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{\infty\}$, expresado como

$$\mathbf{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I}(\boldsymbol{\nu}^*) = \mathbf{arg} \left(\inf_{\boldsymbol{\delta}^* \in D(rG \circ (\frac{1}{r})I)} \left\{ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\delta}^* - \boldsymbol{\nu}^*\|^2 + rG((1/r)\boldsymbol{\delta}^*) \right\} \right). \quad (4.86)$$

Entonces, el problema mixto (\mathbf{M}) tiene la interpretación de proximación aumentada siguiente,

$$(\mathbf{M}_r) \begin{cases} \text{Encuentre } (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}^*) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \times \mathcal{D}(\partial G^*) : \\ -\boldsymbol{\Lambda}^T \left(\boldsymbol{\lambda}^* - \mathbf{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I}(\boldsymbol{\lambda}^* + r\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}) \right) \in (\mathcal{A} + r\boldsymbol{\Lambda}^T\boldsymbol{\Lambda})(\boldsymbol{\alpha}), \\ \boldsymbol{\lambda}^* = \left(\mathbf{I} - \mathbf{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I} \right) (\boldsymbol{\lambda}^* + r\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}). \end{cases}$$

Esta forma aumentada del problema (\mathbf{M}) que de hecho corresponde a una penalización exacta con parámetro r [20], tiene la ventaja de ser un problema mixto bien condicionado para el cual los algoritmos tipo Uzawa asociados son mas eficientes [21, 22 y 23]. En consecuencia, de manera natural asociamos al problema (\mathbf{M}) el siguiente algoritmo tipo Uzawa para su resolución.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Algoritmo I. Dados } \boldsymbol{\alpha}_0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A}), \boldsymbol{\lambda}_0^* \in \mathcal{D}(\partial G^*), \\ \text{conocer } \boldsymbol{\alpha}_n, \boldsymbol{\lambda}_n^*, n \geq 0, \\ \text{calcular } \boldsymbol{\alpha}_{n+1} \text{ y } \boldsymbol{\lambda}_{n+1}^* : \\ -\boldsymbol{\Lambda}^T \left(\boldsymbol{\lambda}_n^* - \mathbf{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I}(\boldsymbol{\lambda}_n^* + r\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}_n) \right) \in (\mathcal{A} + r\boldsymbol{\Lambda}^T\boldsymbol{\Lambda})(\boldsymbol{\alpha}_{n+1}), \\ \boldsymbol{\lambda}_{n+1}^* = \left(\mathbf{I} - \mathbf{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I} \right) (\boldsymbol{\lambda}_n^* + r\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}_{n+1}). \end{array} \right.$$

Para la implementación computacional en paralelo de este algoritmo de punto próximo de dos campos, de acuerdo con las relaciones vectoriales y operacionales (4.81,4.82), considerando la dualización e integración de (4.82₄) para obtener de manera explícita el superpotencial primal G como,

$$G(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\nu}) = \mathbf{I}_{\{-q_{pe}\}}(\boldsymbol{\mu}) + \mathbf{I}_{Q_{Dh}}(\boldsymbol{\nu}), \quad (\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\nu}) \in \mathbf{Y}, \quad (4.87)$$

donde, Q_{Dh} es el subespacio conjugado de Q_{Nh}^* , esto es, $(\mathbf{I}_{Q_{Nh}^*})^* = \mathbf{I}_{Q_{Dh}}$.

En la práctica, es conveniente implementar mallas de frontera interna conformes, pero independientes de las trazas de las mallas interiores. En ese caso, considerando que los espacios de frontera interna (3.22) coinciden en las interfases, los subespacios de transmisión Q_D y Q_N^* referidos en (2.73), se pueden expresar de manera natural en su versión discreta como,

$$\begin{aligned} Q_{D_h} &= \left\{ \{\boldsymbol{\nu}_e\} \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{k_{he}} : \sum_{l=1}^{k_{he}} \nu_{e,l} \xi_{e,l} = - \sum_{l=1}^{k_{hk}} \nu_{k,l} \xi_{k,l} \text{ sobre } \Gamma_{ek} \right\}, \\ Q_{N_h}^* &= \left\{ \{q_e\} \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{k_{he}} : \sum_{l=1}^{k_{he}} q_{e,l} \xi_{e,l} = \sum_{l=1}^{k_{hk}} q_{k,l} \xi_{k,l} \text{ sobre } \Gamma_{ek} \right\}. \end{aligned} \quad (4.88)$$

Por otra parte, el operador de proximación (4.86) puede ser expresado como,

$$\begin{aligned} \mathbf{Prox}_{rG \circ (1/r)I}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\nu}) &= \left(\mathbf{Proj}_{\{-r\widehat{q}_{pe}\}}(\boldsymbol{\mu}), \mathbf{Proj}_{Q_{N_h}}(\boldsymbol{\nu}) \right) \\ &= \left(-r\{\widehat{q}_{pe}\}, \mathbf{Proj}_{Q_{N_h}}(\boldsymbol{\nu}) \right). \end{aligned} \quad (4.89)$$

A continuación, para propósitos de claridad, se muestran explícitamente los operadores y vectores que intervienen en el **Algoritmo I**, para el componente velocidad total-presión global (\mathbf{u}_e, p_e) , sin considerar el superíndice m , que está asociado con el tiempo.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Lambda} &= \begin{pmatrix} \mathbf{L} \\ \mathbf{T} \end{pmatrix}, & \boldsymbol{\lambda}^* &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{\pi} \end{pmatrix}, \\ \boldsymbol{\Lambda}^T &= (\mathbf{L}^T \quad \mathbf{T}^T), & \boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\Lambda} &= \mathbf{L}^T \mathbf{L} + \mathbf{T}^T \mathbf{T}, \\ \boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\lambda}^* &= \mathbf{L}^T \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{T}^T \boldsymbol{\pi}, & \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha} &= \begin{pmatrix} \mathbf{L} \boldsymbol{\alpha}_{u_e} \\ \mathbf{T} \boldsymbol{\alpha}_{u_e} \end{pmatrix}, \\ \boldsymbol{\mathcal{A}} \boldsymbol{\alpha} &= \left\{ \mathbf{A}_{u_e}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{u_e} - \mathbf{f}_{u_e}(\boldsymbol{\vartheta}_e) + \partial \mathbf{I}_{K_{unhe}^*} \right\}. \end{aligned} \quad (4.90)$$

Con base en (4.90), se puede expresar cada término de las ecuaciones primal y dual del **Algoritmo I** para el componente (\mathbf{u}_e, p_e) , en la siguiente forma,

$$\begin{cases} (\boldsymbol{\mathcal{A}} + r \boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\Lambda})(\boldsymbol{\alpha}_{n+1}) = -\boldsymbol{\Lambda}^T (\boldsymbol{\lambda}_n^* - \mathbf{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I}(\boldsymbol{\lambda}_n^* + r \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}_n)), \\ \boldsymbol{\lambda}_{n+1}^* = \left(\mathbf{I} - \mathbf{Prox}_{rG \circ (\frac{1}{r})I} \right) (\boldsymbol{\lambda}_n^* + r \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}_{n+1}). \end{cases} \quad (4.91)$$

El término izquierdo de la ecuación (4.91₁) es,

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\mathcal{A}} + r \boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\Lambda})(\boldsymbol{\alpha}_{n+1}) &= \boldsymbol{\mathcal{A}}(\boldsymbol{\alpha}_{n+1}) + r \boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{\alpha}_{n+1}) \\ &= \left\{ \mathbf{A}_{u_e}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{u_e, n+1} - \mathbf{f}_{u_e}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \right\} + (r \mathbf{L}^T \mathbf{L} + r \mathbf{T}^T \mathbf{T})(\boldsymbol{\alpha}_{u_e, n+1}). \end{aligned} \quad (4.92)$$

El término derecho de la propia ecuación (4.91₁) esta dado por,

$$\left\{ \begin{aligned}
& -\mathbf{\Lambda}^T \left(\boldsymbol{\lambda}_n^* - \mathbf{Prox}_{rG\circ(\frac{1}{r})I}(\boldsymbol{\lambda}_n^* + r\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}_n) \right) \\
& = - \left(\mathbf{L}^T \quad \mathbf{T}^T \right) \left(\begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda}_{e,n} \\ \boldsymbol{\pi}_{e,n} \end{pmatrix} - \mathbf{Prox}_{rG\circ(\frac{1}{r})I} \left\{ \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda}_{e,n} \\ \boldsymbol{\pi}_{e,n} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} \mathbf{L}\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n} \\ \mathbf{T}\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n} \end{pmatrix} \right\} \right) \\
& = - \left(\mathbf{L}^T \quad \mathbf{T}^T \right) \left(\begin{matrix} \boldsymbol{\lambda}_{e,n} + r\hat{\mathbf{q}}_{p_e} \\ \boldsymbol{\pi}_{e,n} - \mathbf{Proj}_{Q_{Dh}}(\boldsymbol{\pi}_{e,n} + r\mathbf{T}_e\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n}) \end{matrix} \right) \\
& = -\mathbf{L}^T(\boldsymbol{\lambda}_{e,n} + r\hat{\mathbf{q}}_{p_e}) - \mathbf{T}^T \left(\boldsymbol{\pi}_{e,n} - \mathbf{Proj}_{Q_{Dh}}(\boldsymbol{\pi}_{e,n} + r\mathbf{T}_e\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n}) \right).
\end{aligned} \right. \quad (4.93)$$

Por último, las dos ecuaciones duales representadas por $\boldsymbol{\lambda}_{n+1}^*$, (4.91₂), pueden expresarse como,

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda}_{e,n+1} \\ \boldsymbol{\pi}_{e,n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda}_{e,n} \\ \boldsymbol{\pi}_{e,n} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} \mathbf{L}\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n+1} \\ \mathbf{T}\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n+1} \end{pmatrix} - \mathbf{Proj}_{Q_{Dh}} \left\{ \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda}_{e,n} \\ \boldsymbol{\pi}_{e,n} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} \mathbf{L}\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n+1} \\ \mathbf{T}\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n+1} \end{pmatrix} \right\} \quad (4.94)$$

Entonces, el **Algoritmo I** para el componente velocidad total-presión global en el paso de tiempo m , queda expresado en forma explícita como,

$$\left\{ \begin{aligned}
& \mathbf{Algoritmo I}'. \text{ Dados } \boldsymbol{\alpha}_{u_e,0}^m \in \prod_{e=1}^E \mathbf{K}_{\hat{u}_{n_{he}}}, (\{\boldsymbol{\lambda}_{e,0}^m\}, \{\boldsymbol{\pi}_{e,0}^m\}) \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}} \times Q_{Nh}^*, \quad n \geq 0, \\
& \text{calcular en paralelo } \boldsymbol{\alpha}_{u_e,n+1}^m \text{ y } \boldsymbol{\lambda}_{e,n+1}^m, \text{ para } e=1,2,\dots,E: \\
& (\mathbf{A}_{u_e}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) + r\mathbf{L}_e^T\mathbf{L}_e + r\mathbf{T}_e^T\mathbf{T})\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n+1}^m \cdot \boldsymbol{\beta} = -\mathbf{L}^T(\boldsymbol{\lambda}_{e,n}^m + r\hat{\mathbf{q}}_{p_e}^m) \cdot \boldsymbol{\beta} \\
& \quad - \mathbf{T}^T \left(\boldsymbol{\pi}_{e,n}^m - \mathbf{Proj}_{Q_{Dh}}(\boldsymbol{\pi}_{e,n}^m + r\mathbf{T}_e\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n}^m) \right) \cdot \boldsymbol{\beta} + \mathbf{f}_{u_e}^m(\boldsymbol{\vartheta}_e) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0_{n_{he}}}, \\
& \boldsymbol{\lambda}_{e,n+1}^m = \boldsymbol{\lambda}_{e,n}^m + r\mathbf{L}_e\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n+1}^m + r\hat{\mathbf{q}}_{p_e,n}^m, \\
& \text{y } \{\boldsymbol{\pi}_{e,n+1}^m\} \in Q_{Nh}^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\
& \{\boldsymbol{\pi}_{e,n+1}^m\} = \{\boldsymbol{\pi}_{e,n}^m + r\mathbf{T}_e\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n+1}^m\} - \mathbf{Proj}_{Q_{Dh}}(\boldsymbol{\pi}_{e,n}^m + \mathbf{T}_e\boldsymbol{\alpha}_{u_e,n+1}^m).
\end{aligned} \right.$$

En el **Algoritmo I'** deben diferenciarse los superíndices m que corresponden al paso de tiempo y los subíndices n y $n + 1$ que corresponden al proceso iterativo. Como resultado de este algoritmo, se pueden conocer los campos velocidad total-presión global a través de sus coordenadas de elemento finito $(\boldsymbol{\alpha}_{u_e}^m, \boldsymbol{\lambda}_e^m)$.

Para el segundo componente del modelo de flujo bifásico (\mathbf{w}_e, s_e) , partiendo de su versión discreta y considerando como esquema de integración numérica en el tiempo un implícito de Euler, se expresa (MHMB2_h) en la forma subdiferencial como,

$$(MHMBD2_h) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\boldsymbol{\alpha}_{w_e}, \boldsymbol{\vartheta}_e) : (0, T) \rightarrow \mathbf{K}_{\widehat{\mathbf{w}}_{he}} \times \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\ \text{con la condición inicial, } \boldsymbol{\vartheta}_e(x, 0) = \boldsymbol{\vartheta}_{0e}(x), \quad \text{para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -(\mathbf{L}_e^T \boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} + \mathbf{T}_e^T \boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}) \cdot \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{A}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} - \mathbf{f}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e)) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0n_{he}}, \\ \mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \cdot \boldsymbol{\mu} = \left(\mathbf{M}_{s_e}^* \frac{\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} - \boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m)}{\Delta t} - \widehat{\mathbf{q}}_{s_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \right) \cdot \boldsymbol{\mu}, \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\ \text{y } \{\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}\} : (0, T) \rightarrow \mathbf{Q}_{N_h}^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\ \{\mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}\} \in \partial \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{N_h}^*}(\{\boldsymbol{\varrho}_e\}) \quad \forall \{\boldsymbol{\nu}\} \in \mathbf{Q}_{N_h}^*. \end{array} \right.$$

Entonces, desarrollando las expresiones de (MHMB2_h) en términos de $\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1}$ y $\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}$ e identificando $\Delta t = r_t$,

$$\begin{aligned} -\mathbf{L}_e^T \boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} - \mathbf{T}_e^T \boldsymbol{\varrho}_e^{m+1} &\in \mathbf{A}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} - \mathbf{f}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e), \\ \mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} &= \mathbf{M}_{s_e}^* \frac{\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} - \boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m)}{r_t} - \widehat{\mathbf{q}}_{s_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e), \\ \boldsymbol{\varrho}_e^{m+1} &= \boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} - \mathbf{Proj}(\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1}). \end{aligned} \quad (4.95)$$

La expresión para (4.95₃), se obtuvo por integración numérica en el tiempo con base en un esquema de proximación, en donde se introdujo el operador resolvente del subdiferencial $\partial \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{N_h}^*}$ en la siguiente forma,

$$\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \in \left(\mathbf{I} + r_t \partial \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{N_h}^*} \right) (\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}), \quad (4.96)$$

y por definición

$$\mathbf{J}_{\partial \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{N_h}^*}}^{r_t} \equiv \left(\mathbf{I} + r_t \partial \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{N_h}^*} \right)^{-1}, \quad (4.97)$$

de donde se tiene que,

$$\{\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}\} = \mathbf{J}_{\partial \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{N_h}^*}}^{r_t} \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \right), \quad (4.98)$$

pero,

$$\mathbf{J}_{\partial \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{N_h}^*}}^{r_t} = \mathbf{I} - \mathbf{Proj}_{\mathbf{Q}_{Dh}}, \quad (4.99)$$

entonces,

$$\{\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}\} = \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \right) - \mathbf{Proj}_{\mathbf{Q}_{Dh}} \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \right). \quad (4.100)$$

En consecuencia, (4.95) puede ser expresada como,

$$\begin{aligned}
& -\mathbf{L}_e^T \boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} - \mathbf{T}_e^T \boldsymbol{\varrho}_e^{m+1} \in \mathbf{A}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} - \mathbf{f}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e), \\
& \boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} = \boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m) + r_t \mathbf{M}_{s_e}^{-*} \left(\mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} + \widehat{\mathbf{q}}_{s_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \right), \\
& \boldsymbol{\varrho}_e^{m+1} = \boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} - \mathbf{P}roj \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \right).
\end{aligned} \tag{4.101}$$

Ahora bien, al sustituir $\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1}$ y $\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}$ en (4.101₁) por sus correspondientes expresiones, se obtiene,

$$\begin{aligned}
& -\mathbf{L}_e^T \left(\boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m) + r_t \mathbf{M}_{s_e}^{-*} \widehat{\mathbf{q}}_{s_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \right) - \mathbf{T}_e^T \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m - \mathbf{P}roj \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \right) \right) \\
& \quad \in \left(\mathbf{A}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) + r_t \mathbf{L}_e^T \mathbf{M}_{s_e}^{-*} \mathbf{L}_e + r_t \mathbf{T}_e^T \mathbf{T}_e \right) \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} - \mathbf{f}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e), \\
& \boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} = \boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m) + r_t \mathbf{M}_{s_e}^{-*} \left(\mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} + \widehat{\mathbf{q}}_{s_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \right), \\
& \boldsymbol{\varrho}_e^{m+1} = \boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} - \mathbf{P}roj \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \right).
\end{aligned} \tag{4.102}$$

Entonces, el algoritmo para el segundo componente del modelo de flujo bifásico, queda expresado de la siguiente manera.

$$\left\{ \begin{array}{l}
\mathbf{Algoritmo II}'. \text{ Dados } \{\boldsymbol{\alpha}_{w_e}^0\} \in \prod_{e=1}^E \mathbf{K}_{\widehat{w}_{nhe}}, (\{\boldsymbol{\vartheta}_e^0\}, \{\boldsymbol{\varrho}_e^0\}) \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}} \times Q_{Nh}^*, \\
\text{con la condición inicial } \boldsymbol{\vartheta}_e(x, 0) = \boldsymbol{\vartheta}_{0e}(x), \text{ y } m \geq 0, \\
\text{calcular en paralelo } \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \text{ y } \boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1}, \text{ para } e = 1, 2, \dots, E : \\
\left(\mathbf{A}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) + r_t \mathbf{L}_e^T \mathbf{M}_{s_e}^{-*} \mathbf{L}_e + r_t \mathbf{T}_e^T \mathbf{T}_e \right) \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \cdot \boldsymbol{\beta} \\
= -\mathbf{L}_e^T \left(\boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m) + r_t \mathbf{M}_{s_e}^{-*} \widehat{\mathbf{q}}_{s_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \right) \cdot \boldsymbol{\beta} \\
- \mathbf{T}_e^T \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m - \mathbf{P}roj_{Q_{Dh}} \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \right) \right) \cdot \boldsymbol{\beta} + \mathbf{f}_{w_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0nhe}, \\
\boldsymbol{\vartheta}_e^{m+1} = \boldsymbol{\vartheta}_e^m(X^m) + r_t \mathbf{M}_{s_e}^{-*} \left(\mathbf{L}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} + \widehat{\mathbf{q}}_{s_e}^{m+1}(\boldsymbol{\vartheta}_e) \right), \\
\text{y } \{\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}\} \in Q_{Nh}^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización,} \\
\{\boldsymbol{\varrho}_e^{m+1}\} = \{\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1}\} - \mathbf{P}roj_{Q_{Dh}} \left(\boldsymbol{\varrho}_e^m + r_t \mathbf{T}_e \boldsymbol{\alpha}_{w_e}^{m+1} \right).
\end{array} \right.$$

Los procesos iterativos establecidos por medio del **Algoritmo I'** y el **Algoritmo II'**, una vez que estos algoritmos sean codificados, permitirán conocer de manera numérica la distribución de los campos $(\mathbf{u}, p, \mathbf{w}, s)$ en cada subdominio, y en consecuencia, se podrán establecer las distribuciones de los campos físicos $(\mathbf{u}_w, \mathbf{u}_n, p_w, p_n, s_w, s_n)$ para cada subdominio. La

codificación de estos algoritmos para obtener el modelo computacional, se hará en el siguiente capítulo de este trabajo.

Para concluir esta sección, se presentan las expresiones de los parámetros físicos que se usarán para propósitos de experimentación numérica. De acuerdo con Helmig [7], la saturación efectiva, las permeabilidades relativas y la presión capilar, pueden expresarse de la siguiente manera.

Para la saturación efectiva,

$$s_e = \left(\frac{s_w - s_{rw}}{1 - s_{rw} - s_{rn}} \right), \quad s_{rw} \leq s_w \leq 1 - s_{rn}. \quad (4.103)$$

Para las permeabilidades relativas,

$$\begin{aligned} k_{rw}(s_e) &= s_e^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}}, \\ k_{rn}(s_e) &= (1 - s_e)^2 \left(1 - s_e^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} \right), \end{aligned} \quad (4.104)$$

y con $\lambda = 2$, se tiene

$$\begin{aligned} k_{rw}(s_e) &= s_e^4, \\ k_{rn}(s_e) &= (1 - s_e)^2 (1 - s_e^2). \end{aligned} \quad (4.105)$$

Con base en las expresiones anteriores, las derivadas de las permeabilidades relativas resultan ser,

$$\frac{dk_{rw}}{ds_w} = 4s_e^3 \left(\frac{1}{1 - s_{rw} - s_{rn}} \right) = 4 \left(\frac{s_w - s_{rw}}{1 - s_{rw} - s_{rn}} \right)^3 \left(\frac{1}{1 - s_{rw} - s_{rn}} \right), \quad (4.106)$$

$$\begin{aligned} \frac{dk_{rn}}{ds_w} &= 2(1 - s_e) \left(\frac{-1}{1 - s_{rw} - s_{rn}} \right) (1 - s_e^2) + (1 - s_e)^2 (-2s_e) \left(\frac{1}{1 - s_{rw} - s_{rn}} \right) \\ &= \left(\frac{-2}{1 - s_{rw} - s_{rn}} \right) \left\{ (1 - s_e)(1 - s_e^2) + (1 - s_e)^2 (s_e) \right\} \\ &= \frac{-2(1 - s_e)^2 (1 + 2s_e)}{(1 - s_{rw} - s_{rn})}. \end{aligned} \quad (4.107)$$

La derivada de λ_w queda expresada como,

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda_w}{ds} &= \frac{\lambda \mu_w \frac{dk_{rw}}{ds} - k_{rw} \mu_w \frac{d\lambda}{ds}}{\lambda^2 \mu_w^2} \\ &= \frac{\frac{\mu_w}{\mu_n} \left\{ k_{rn} \frac{dk_{rw}}{ds} - k_{rw} \frac{dk_{rn}}{ds} \right\}}{\lambda^2 \mu_w^2} \\ &= \frac{2 \left\{ 2k_{rn} s_e^3 + k_{rw} (1 - s_e)^2 (1 + 2s_e) \right\}}{\mu_w \mu_n \lambda^2 (1 - s_{rw} - s_{rn})}. \end{aligned} \quad (4.108)$$

Presión capilar y su derivada.

$$\begin{aligned} p_c(s_w) &= p_d s_e^{-1/2} = p_d \left(\frac{s_w - s_{rw}}{1 - s_{rw} - s_{rn}} \right)^{-1/2}, \quad s_{rw} \leq s_w \leq 1 - s_{rn}, \\ p'_c(s_w) &= -\frac{1}{2} p_d \left(\frac{s_w - s_{rw}}{1 - s_{rw} - s_{rn}} \right)^{-3/2} \frac{1}{(1 - s_{rw} - s_{rn})}, \quad s_{rw} \leq s_w \leq 1 - s_{rn}. \end{aligned} \quad (4.109)$$

Otra expresión para los parámetros físicos de acuerdo con J. Douglas Jr. [8], es la siguiente.

Permeabilidades relativas

$$k_{rw}(s) = \frac{(s - s_{rw})^2}{(1 - s_{rw})^2},$$

$$k_{rn}(s) = \frac{(1 - s_{rn} - s)^2}{(1 - s_{rn})^2}.$$

Presión capilar y su derivada.

$$p_c(s) = -\eta \left(\frac{1}{(s - s_{rw})^2} - \frac{\zeta}{(1 - s)^2} \right),$$

$$p'_c(s) = 2\eta \left(\frac{1}{(s - s_{rw})^3} - \frac{\zeta}{(1 - s)^3} \right),$$

donde,

$$\eta = 300 \text{ Pa},$$

$$\zeta = \frac{s_{rn}^2}{(1 - s_{rn} - s_{rw})^2}.$$

La derivada de λ_w

$$\frac{d\lambda_w}{ds} = \frac{\lambda\mu_w \frac{dk_{rw}}{ds} - k_{rw}\mu_w \frac{d\lambda}{ds}}{\lambda^2\mu_w^2}$$

$$= \frac{2}{\mu_w\mu_n\lambda^2} \left\{ k_{rn} \frac{(s - s_{rw})}{(1 - s_{rw})^2} + k_{rw} \frac{(1 - s_{rn} - s)}{(1 - s_{rn})^2} \right\}$$

En este trabajo, para propósitos de experimentación numérica , se usarán las expresiones reportadas por Helmig [7].

Capítulo 5

MODELO COMPUTACIONAL BIFÁSICO TRIDIMENSIONAL

5.1 ESTRUCTURA DEL MODELO COMPUTACIONAL

En esta sección se describen las características del modelo computacional desarrollado para simular el flujo bifásico inmiscible incompresible tridimensional en un medio poroso. La implementación de este modelo se hizo en FORTRAN 77, con el propósito de aprovechar algunas de las características que posee MODULEF para la visualización de resultados. Los algoritmos programados corresponden a los modelos macrohíbridos mixtos acoplados velocidad total-presión global (\mathbf{u}, p) y flujo de saturación-saturación (\mathbf{w}, s) .

Las características del programa desarrollado son las siguientes.

1. El programa está estructurado en forma modular por subdominios, esto es, para incorporar o eliminar un subdominio en el programa, basta con agregar o eliminar un conjunto de variables y establecer o eliminar la interacción del subdominio con los ya existentes, a través de un conjunto de parámetros previamente establecidos.
2. El programa permite realizar simulaciones de flujo bifásico, considerando medios porosos heterogéneos y anisótropos, con una geometría tridimensional construida en base a la unión de subdominios rectangulares tridimensionales.
3. En la discretización espacial de los subdominios, se han utilizado elementos finitos tipo paralelepípedo, localmente conformes y globalmente no-conformes, esto es, el mallado de un subdominio es completamente independiente del mallado de cualquier otro subdominio, y las trazas de la malla de uno, no necesariamente son coincidentes con las trazas de la malla de los subdominios vecinos.
4. Las mallas de frontera interna que se utilizan para establecer la continuidad de los campos incognita, son independientes de las trazas de las mallas de los subdominios vecinos. Sin embargo, las mallas de frontera interna asociadas con una interface entre dos subdominios vecinos es conforme pero, puede ser diferente entre diferentes interfaces del mismo subdominio.
5. La forma de especificar las condiciones de frontera tipo Dirichlet, de presión global prescrita y saturación prescrita, o tipo Neumann, de flujo total prescrito y flujo de saturación prescrito, se hace considerando las caras externas de cada subdominio Ω_e , en donde, cada cara ha sido etiquetada como A, B, C, D, E y F.

6. Las fuentes y sumideros de ambas fases se establecen por medio de un vector de NE entradas, siendo NE el número de elementos del subdominio correspondiente. En cada entrada de este vector se establece la razón de inyección o extracción asociada al elemento finito, para cada una de las fases. La misma forma se utiliza para especificar las propiedades del medio.

7. En la aproximación de los espacios funcionales discretos de los campos incognita, se utilizaron elementos finitos mixtos seccionalmente lineales y seccionalmente constantes, para aproximar los campos velocidad total-flujo de saturación $(\mathbf{u}, \mathbf{w}) \in H(\text{div}; \cdot)$, y presión global-saturación $(p, s) \in L^2$.

La secuencia que sigue el programa al realizar las simulaciones es la siguiente.

En la primera parte del programa se establecen las propiedades físicas del medio y de los fluidos, así como la discretización espacial de los subdominios y de las fronteras internas. También se especifican los parámetros de iteración y el paso de tiempo a utilizar en la simulación.

En la segunda parte del programa se establecen las condiciones de frontera para ambos modelos, y su respectiva condición inicial. También en esta parte se establecen las fuentes y sumideros en cada subdominio.

En la tercera parte del programa se construyen las matrices y vectores de elemento finito para ambos modelos (\mathbf{u}, p) y (\mathbf{w}, s) . En la construcción de las matrices se ha utilizado una forma de almacenamiento óptima, en la cual, solo se guardan las entradas diferentes de cero, y también, solo se opera con las entradas diferentes de cero. Esto se ha hecho con el propósito de hacer mas eficientes los cálculos, y requerir menos espacio para su almacenamiento, dado que, las matrices para sistemas tridimensionales son bastante grandes.

En la cuarta parte del programa, se obtienen en forma iterativa los campos velocidad total-presión global para cada subdominio, y se establece la continuidad de estos a través de las interfases entre subdominios. Como resultado, al final del proceso iterativo, cuando se alcanza la tolerancia requerida para la norma del error, se obtienen los coeficientes de elemento finito, que nos permiten conocer el valor de (\mathbf{u}, p) en cada punto de cada subdominio.

En la quinta parte del programa, una vez obtenidos los coeficientes de elemento finito para los campos del primer modelo (\mathbf{u}, p) , se utiliza el primer campo como dato, para alimentar el segundo modelo (\mathbf{w}, s) , y por medio de un proceso iterativo análogo al del modelo anterior, se obtienen los coeficientes de elemento finito para construir los campos flujo de saturación-saturación para cada subdominio, y también de manera iterativa, se establece su continuidad a través de las interfases.

Una vez alcanzado este punto, se ha simulado el primer paso de tiempo para el modelo de flujo bifásico. Para continuar con la simulación del siguiente paso de tiempo, se retorna a la tercera parte del programa y se repite el proceso. Sin embargo, si se desea visualizar los resultados obtenidos hasta el momento, se utilizan los campos obtenidos de ambos modelos y se recuperan los campos físicos del problema para su representación gráfica.

Para la visualización de resultados, se desarrolló un programa que utiliza algunas de las subrutinas de MODULEF y permite presentar los resultados en un formato cromático vectorial. El formato cromático está asociado a los campos presión y saturación de cada fase, y la parte vectorial se asocia con los campos velocidad de cada fase.

Finalmente, y para propósitos de claridad respecto a la estructura del código, se presenta un listado del programa principal para una versión de dos subdominios.

5.2 VERSIÓN PARA DOS SUBDOMINIOS

Listado del programa principal para una versión de dos subdominios del modelo de flujo bifásico tridimensional.

```
* PROGRAMA PARA SIMULAR FLUJO BIFASICO INMISCIBLE INCOMPRESIBLE
* VERSION TRIDIMENSIONAL PARA DOS SUBDOMINIOS
* SE UTILIZAN DOS MODELOS MACROHIBRIDOS MIXTOS
* (VEL.TOTAL-PRESION GLOBAL) (FLUJO DE SATURACION-SATURACION)
*****
**** PARAMETROS AUXILIARES QUE NO SE MODIFICAN*****
PARAMETER (LS0=1, MS0=1, NS0=1)
PARAMETER (MFA0=1,NFA0=1,MFB0=1,LFB0=1) !DE FRONT.INT. (A,B)
PARAMETER (MFC0=1,NFC0=1,MFD0=1,LFD0=1) !DE FRONT.INT. (C,D)
PARAMETER (LFE0=1,NFE0=1,LFF0=1,NFF0=1) !DE FRONT.INT. (E,F)
PARAMETER (NMS0=3*LS0*MS0*NS0+MS0*NS0+LS0*NS0+MS0*LS0)
PARAMETER (NFII0=MFA0*NFA0+MFB0*LFB0+MFC0*NFC0)
PARAMETER (NFIJ0=MFD0*LFD0+LFE0*NFE0+LFF0*NFF0)
PARAMETER (NFI0=NFII0+NFIJ0)
*****0
* ESTOS PARAMETROS SE ESTABLECEN PARA CADA SUBDOMINIO
PARAMETER (NSB=2)
PARAMETER (LS1=7, MS1=9, NS1=8)
PARAMETER (MFA1=5,NFA1=5,MFB1=1,LFB1=1) !DE FRONT.INT. (A,B)
PARAMETER (MFC1=1,NFC1=1,MFD1=1,LFD1=1) !DE FRONT.INT. (C,D)
PARAMETER (LFE1=1,NFE1=1,LFF1=1,NFF1=1) !DE FRONT.INT. (E,F)
PARAMETER (LS2=6, MS2=7, NS2=5)
PARAMETER (MFA2=1,NFA2=1,MFB2=1,LFB2=1) !DE FRONT.INT. (A,B)
PARAMETER (MFC2=5,NFC2=5,MFD2=1,LFD2=1) !DE FRONT.INT. (C,D)
PARAMETER (LFE2=1,NFE2=1,LFF2=1,NFF2=1) !DE FRONT.INT. (E,F)
*****1
PARAMETER (NMS1=3*LS1*MS1*NS1+MS1*NS1+LS1*NS1+MS1*LS1)
PARAMETER (NFII1=MFA1*NFA1+MFB1*LFB1+MFC1*NFC1)
PARAMETER (NFIJ1=MFD1*LFD1+LFE1*NFE1+LFF1*NFF1)
PARAMETER (NE1=LS1*MS1*NS1,NFI1=NFII1+NFIJ1)
PARAMETER (NNA1=MS1+LS1+MFA1+MFB1+MFC1+MFD1+LFE1+LFF1)
PARAMETER (NNB1=NS1+LS1+NFA1+LFB1+NFC1+LFD1+NFE1+NFF1)
PARAMETER (NMS2=3*LS2*MS2*NS2+MS2*NS2+LS2*NS2+MS2*LS2)
PARAMETER (NFII2=MFA2*NFA2+MFB2*LFB2+MFC2*NFC2)
PARAMETER (NFIJ2=MFD2*LFD2+LFE2*NFE2+LFF2*NFF2)
PARAMETER (NE2=LS2*MS2*NS2,NFI2=NFII2+NFIJ2)
PARAMETER (NNA2=MS2+LS2+MFA2+MFB2+MFC2+MFD2+LFE2+LFF2)
PARAMETER (NNB2=NS2+LS2+NFA2+LFB2+NFC2+LFD2+NFE2+NFF2)
*****2
* DIMENSIONAMIENTO DE VARIABLES
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
INTEGER NESB1(NNA1),NEFA1(NNA1),NESB1(NNB1),NEFB1(NNB1)
```


INTEGER NEFAO1(NNA1*NNB1),NESAO1(NNA1*NNB1)
 INTEGER NRMT1(NFI1+1),NRMTT1(NMS1+1),NRMTTT1(NMS1+1)
 INTEGER NRML1(NE1+1),NRMLT1(NMS1+1),NRMLTL1(NMS1+1)
 INTEGER NRAU1(NMS1+1),NRAULT1(NMS1+1)
 INTEGER NCMT1(50*NMS1),NCMTT1(50*NMS1),NCMTTT1(50*NMS1)
 INTEGER NCML1(6*NE1),NCMLT1(6*NE1),NCMLTL1(50*NMS1)
 INTEGER NCAU1(50*NMS1),NCAULT1(50*NMS1),NRIAULT1(NMS1),NRIU1
 INTEGER NRLTML1(NMS1+1),NCLTML1(50*NMS1)
 INTEGER NRAWLT1(NMS1+1),NCAWLT1(50*NMS1),NRIAWLT1(NMS1),NRIW1
 INTEGER NRAW1(NMS1+1),NCAW1(50*NMS1)
 REAL*8 LX1,LY1,LZ1,KXX1,KYY1,KZZ1
 REAL*8 CIA1(NNA1),CIAO1(NNA1*NNB1),CIB1(NNB1),CIBO1(NNA1*NNB1)
 REAL*8 MT1(50*NMS1),MTT1(50*NMS1),MTTT1(50*NMS1)
 REAL*8 ML1(6*NE1),MLT1(6*NE1),MLTL1(50*NMS1),LTML1(50*NMS1)
 REAL*8 AU1(50*NMS1),AULT1(50*NMS1),FULT1(NMS1),PYU1(NFI1)
 REAL*8 KX1(NE1),KY1(NE1),KZ1(NE1),ALFU1(NMS1),ALFW1(NMS1)
 REAL*8 LAMDA1(NE1),FU1(NMS1),FW1(NMS1),AFW1(NMS1),AFU1(NMS1)
 REAL*8 PL1(NE1),LAMDW1(NE1),LAMDN1(NE1),KRW1(NE1),KRN1(NE1)
 REAL*8 AW1(50*NMS1),AWLT1(50*NMS1),FWLT1(NMS1),PYW1(NFI1)
 REAL*8 SAT1(NE1),SATT1(NE1),QGW1(NE1),QGN1(NE1),CS1(NE1)
 REAL*8 PPC1(NE1),PC1(NE1),PD1(NE1),PORO1(NE1),SATF1(NFI1)
 REAL*8 PG1(NMS1),QG1(NE1),QGP1(NE1),SG1(NMS1),QGS1(NE1)
 REAL*8 AXA1(NE1),AXB1(NMS1),AXC1(NFI1),MAS1(NE1),PI1(NFI1)
 INTEGER NESAO2(NNA2),NEFA2(NNA2),NESB2(NNB2),NEFB2(NNB2)
 INTEGER NEFAO2(NNA2*NNB2),NESAO2(NNA2*NNB2)
 INTEGER NRMT2(NFI2+1),NRMTT2(NMS2+1),NRMTTT2(NMS2+1)
 INTEGER NRML2(NE2+1),NRMLT2(NMS2+1),NRMLTL2(NMS2+1)
 INTEGER NRAU2(NMS2+1),NRAULT2(NMS2+1)
 INTEGER NCMT2(50*NMS2),NCMTT2(50*NMS2),NCMTTT2(50*NMS2)
 INTEGER NCML2(6*NE2),NCMLT2(6*NE2),NCMLTL2(50*NMS2)
 INTEGER NCAU2(50*NMS2),NCAULT2(50*NMS2),NRIAULT2(NMS2),NRIU2
 INTEGER NRLTML2(NMS2+1),NCLTML2(50*NMS2)
 INTEGER NRAWLT2(NMS2+1),NCAWLT2(50*NMS2),NRIAWLT2(NMS2),NRIW2
 INTEGER NRAW2(NMS2+1),NCAW2(50*NMS2)
 REAL*8 LX2,LY2,LZ2,KXX2,KYY2,KZZ2
 REAL*8 CIA2(NNA2),CIAO2(NNA2*NNB2),CIB2(NNB2),CIBO2(NNA2*NNB2)
 REAL*8 MT2(50*NMS2),MTT2(50*NMS2),MTTT2(50*NMS2)
 REAL*8 ML2(6*NE2),MLT2(6*NE2),MLTL2(50*NMS2),LTML2(50*NMS2)
 REAL*8 AU2(50*NMS2),AULT2(50*NMS2),FULT2(NMS2),PYU2(NFI2)
 REAL*8 KX2(NE2),KY2(NE2),KZ2(NE2),ALFU2(NMS2),ALFW2(NMS2)
 REAL*8 LAMDA2(NE2),FU2(NMS2),FW2(NMS2),AFW2(NMS2),AFU2(NMS2)
 REAL*8 PL2(NE2),LAMDW2(NE2),LAMDN2(NE2),KRW2(NE2),KRN2(NE2)
 REAL*8 AW2(50*NMS2),AWLT2(50*NMS2),FWLT2(NMS2),PYW2(NFI2)
 REAL*8 SAT2(NE2),SATT2(NE2),QGW2(NE2),QGN2(NE2),CS2(NE2)
 REAL*8 PPC2(NE2),PC2(NE2),PD2(NE2),PORO2(NE2),SATF2(NFI2)
 REAL*8 PG2(NMS2),QG2(NE2),QGP2(NE2),SG2(NMS2),QGS2(NE2)
 REAL*8 AXA2(NE2),AXB2(NMS2),AXC2(NFI2),MAS2(NE2),PI2(NFI2)

```

*****3
* ESTE DIMENSIONAMIENTO Y LAS LLAMADAS NO SE MODIFICAN
INTEGER NRMT0(NFI0+1),NCMT0(50*NMS0)
REAL*8 MUW,MUN,SRW,SRN
REAL*8 MT0(50*NMS0),PI0(NFI0),ALFU0(NMS0)
REAL*8 SATF0(NFI0),ALFW0(NMS0)
CALL NOCAI(NBBA0,NCCB0,NFFC0,NAAD0,NEEE0,NDDF0,
& MFA0,NFA0,MFB0,LFB0,MFC0,NFC0,MFD0,LFD0,LFE0,NFE0)
CALL VAUX(NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,NFI0,NMS0)
CALL VAUX(NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,NFI0,NMS0)
*****
***** PARAMETROS FISICOS
ROW=1000.D0 !Kg/m3 DENSIDAD ACUOSA
RON=700.D0 !Kg/m3 DENSIDAD NO-ACUOSA
MUW=0.001 !Pa-S VISCOSIDAD ACUOSA
MUN=0.0100 !Pa-S VISCOSIDAD NO-ACUOSA
SRW=0.1D0 !SAT.RES.ACUOSA
SRN=0.1D0 !SAT.RES.NO-ACUOSA
G=-9.8D0 !M/S2 VECTOR ACELERACION DE LA GRAVEDAD
*****
* PARAMETROS DE ITERACION Y PASO DE TIEMPO
RU1=5.0E+7 !PARAMETRO DE ITERACION MOD.TIPO INCOMPRESIBLE
RU2=RU1 !PARAMETRO DE ITERACION MOD.TIPO INCOMPRESIBLE
RW1=60.D0 !PASO DE TIEMPO EN (SEGUNDOS) MOD.TIPO COMPRES
RW2=60.D0 !PASO DE TIEMPO EN (SEGUNDOS) MOD.TIPO COMPRES
*****4
* DIMENSIONES DEL SUBDOMINIO
LX1=25.D0 !(m)
LY1=10.D0 !(m)
LZ1=15.D0 !(m)
LX2=15.D0 !(m)
LY2=10.D0 !(m)
LZ2=18.D0 !(m)
*****5
* PERMEABILIDADES ABSOLUTAS INVERSAS EN DIRECCION (X-Y-Z)
KXX1=2.0D+11
KYY1=1.0D+12
KZZ1=1.0D+12
KXX2=2.0D+11
KYY2=1.0D+12
KZZ2=1.0D+12
*****6
* CALCULO DE (KX1,KY1,KZ1)
CALL MATK(KX1,KY1,KZ1,NE1,KXX1,KYY1,KZZ1)
CALL MATK(KX2,KY2,KZ2,NE2,KXX2,KYY2,KZZ2)
*****7
*SELECC. CARAS INCOGNITAS (1=FIJA, 0=VARIABLE) (A,B,C,D,E,F) INCOMPRES

```

```

CALL SELINC(NRIAULT1,NRIU1,LS1,MS1,NS1,NMS1,0,0,1,1,1,1)
CALL SELINC(NRIAULT2,NRIU2,LS2,MS2,NS2,NMS2,1,1,0,1,1,1)
*****8
*SELECC. CARAS INCOGNITAS (1=FIJA, 0=VARIABLE) (A,B,C,D,E,F) COMPRES
CALL SELINC(NRIAWLT1,NRIW1,LS1,MS1,NS1,NMS1,0,0,1,1,1,1)
CALL SELINC(NRIAWLT2,NRIW2,LS2,MS2,NS2,NMS2,1,1,0,1,1,1)
*****9
* COND.FRONT.DIRICHLET ESTABLECER (PGA,PGB,PGC,PGD,PGE,PGF)
PGA1=0.D0;PGB1=0.D0;PGC1=0.D0;PGD1=0.D0;PGE1=0.D0;PGF1=0.D0
PGA2=0.D0;PGB2=0.D0;PGC2=0.D0;PGD2=0.D0;PGE2=0.D0;PGF2=0.D0
*****10
* VECTOR DE CONDICIONES DE FRONTERA DIRICHLET PRES.GLOBAL (PG1)
CALL CFront(PG1,LS1,MS1,NS1,NMS1,PGA1,PGB1,PGC1,PGD1,PGE1,PGF1)
CALL CFront(PG2,LS2,MS2,NS2,NMS2,PGA2,PGB2,PGC2,PGD2,PGE2,PGF2)
*****11
* COND.FRONT.DIRICHLET SATURA. ESTABLECER (SGA,SGB,SGC,SGD,SGE,SGF)
SGA1=0.D0;SGB1=0.11D0;SGC1=0.D0;SGD1=0.D0;SGE1=0.D0;SGF1=0.D0
SGA2=0.D0;SGB2=0.D0;SGC2=0.D0;SGD2=0.D0;SGE2=0.D0;SGF2=0.D0
*****12
* CONSTRUCCION DE LOS VECTORES DE SATURACION PRESCRITA (SG)
CALL CFront(SG1,LS1,MS1,NS1,NMS1,SGA1,SGB1,SGC1,SGD1,SGE1,SGF1)
CALL CFront(SG2,LS2,MS2,NS2,NMS2,SGA2,SGB2,SGC2,SGD2,SGE2,SGF2)
*****13
* CALCULO DE ENTRADAS DE ARRANQUE PARA EL VECTOR PROYECCION
CALL NOCAI(NBBA1,NCCB1,NFFC1,NAAD1,NEEE1,NDDF1,
& MFA1,NFA1,MFB1,LFB1,MFC1,NFC1,MFD1,LFD1,LFE1,NFE1)
CALL NOCAI(NBBA2,NCCB2,NFFC2,NAAD2,NEEE2,NDDF2,
& MFA2,NFA2,MFB2,LFB2,MFC2,NFC2,MFD2,LFD2,LFE2,NFE2)
*****14
* SE ESTABLECE POROSIDAD Y SATURACION-INICIAL DE CADA SUBDOMINIO
CALL PORSAT(PORO1,0.25D0,SAT1,0.80D0,NE1)
CALL PORSAT(PORO2,0.25D0,SAT2,0.80D0,NE2)
*****15
* CALC. MATRIZ (MAS) ES DIAG. MOD.TIPO COMPRES. SE CALCULA (MAS)**(-1)
CALL CALMAS(MAS1,PORO1,LX1,LY1,LZ1,LS1,MS1,NS1,NE1)
CALL CALMAS(MAS2,PORO2,LX2,LY2,LZ2,LS2,MS2,NS2,NE2)
*****16
* CONSTRUCCION DE LAS MATRICES DIVERGENCIA (ML, MLT, MLTL, LTML(MAS))
CALL MATL(ML1,NRML1,NCML1,MLT1,NRMLT1,NCMLT1,MLTL1,NRMLTL1,
& NCMLTL1,LTML1,NRLTML1,NCLTML1,MAS1,LS1,MS1,NS1,NMS1,NE1,
& LX1,LY1,LZ1,AXA1,AXB1)
CALL MATL(ML2,NRML2,NCML2,MLT2,NRMLT2,NCMLT2,MLTL2,NRMLTL2,
& NCMLTL2,LTML2,NRLTML2,NCLTML2,MAS2,LS2,MS2,NS2,NMS2,NE2,
& LX2,LY2,LZ2,AXA2,AXB2)
*****17
CALL MATT(MT1,NRMT1,NCMT1,MTT1,NRMTT1,NCMTT1,
& MTTT1,NRMTTT1,NCMTTT1,LS1,MS1,NS1,MFA1,NFA1,MFB1,LFB1,MFC1,

```

```

& NFC1,MFD1,LFD1,LFE1,NFE1,LFF1,NFF1,NFI1,NMS1,NNA1,NNB1,NESA1,
& NEFA1,NESB1,NEFB1,NEFAO1,NESAO1,CIA1,CIB1,CIAO1,CIBO1,AXC1,
& AXB1,LX1,LY1,LZ1)
CALL MATT(MT2,NRMT2,NCMT2,MTT2,NRMTT2,NCMTT2,
& MTTT2,NRMTTT2,NCMTTT2,LS2,MS2,NS2,MFA2,NFA2,MFB2,LFB2,MFC2,
& NFC2,MFD2,LFD2,LFE2,NFE2,LFF2,NFF2,NFI2,NMS2,NNA2,NNB2,NESA2,
& NEFA2,NESB2,NEFB2,NEFAO2,NESAO2,CIA2,CIB2,CIAO2,CIBO2,AXC2,
& AXB2,LX2,LY2,LZ2)
*****18
WRITE(*,*)' LEER CAMPOS? 1/SI:0/NO'
READ(*,*)ISN
IF(ISN.EQ.1)THEN
OPEN(UNIT=1,FILE='SALVA')
CALL LECT(LAMDA1,SAT1,ALFU1,ALFW1,PI1,SATF1,NE1,NMS1,NFI1,NITT)
CALL LECT(LAMDA2,SAT2,ALFU2,ALFW2,PI2,SATF2,NE2,NMS2,NFI2,NITT)
*****19
CLOSE(UNIT=1)
GOTO 20
ELSE
GOTO 19
ENDIF
19 NITT=1
20 NITP=0
* SATT1=SAT1 SATT1 ES LA SAT.EN EL TIEMPO ANTERIOR
CALL SATANT(SATT1,SAT1,NE1)
CALL SATANT(SATT2,SAT2,NE2)
*****20
* DEFINICION DE FUENTES Y SUMIDEROS
C QGW1(1)=0.050D0
NOD2=(LS2*MS2)*(NS2-1)+LS2
IF((1.D0-SAT2(NOD2)).GT.0.21D0)THEN
QGW2(NOD2)=-LAMDW2(NOD2)*0.025D0
QGN2(NOD2)=-LAMDN2(NOD2)*0.025D0
ELSE
QGW2(NOD2)=-0.025D0
ENDIF
IF((1.D0-SAT2(NE2)).GT.0.21D0)THEN
QGW2(NE2)=-LAMDW2(NE2)*0.025D0
QGN2(NE2)=-LAMDN2(NE2)*0.025D0
ELSE
QGW2(NE2)=-0.025D0
ENDIF
*****
* CONSTRUCCION DEL VECTOR DE FUENTES (QGP), QG=QGW+QGN
CALL VECTQGP(QGP1,QG1,QGW1,QGN1,LS1,MS1,NS1,NE1,LX1,LY1,LZ1)
CALL VECTQGP(QGP2,QG2,QGW2,QGN2,LS2,MS2,NS2,NE2,LX2,LY2,LZ2)
*****21

```

```

* CALCULO DE (PL,LAMDW,LAMDN,KRW,KRN)(SAT)
CALL LAMDWN(PL1,LAMDW1,LAMDN1,KRW1,KRN1,SAT1,SRW,SRN,
& MUW,MUN,NE1)
CALL LAMDWN(PL2,LAMDW2,LAMDN2,KRW2,KRN2,SAT2,SRW,SRN,
& MUW,MUN,NE2)
*****22
* CONSTRUCCION DE LAS MATRICES (AU) PL1=PL1(SAT1)
CALL MATAU(AU1,NRAU1,NCAU1,PL1,LS1,MS1,NS1,NMS1,NE1,
& LX1,LY1,LZ1,KX1,KY1,KZ1)
CALL MATAU(AU2,NRAU2,NCAU2,PL2,LS2,MS2,NS2,NMS2,NE2,
& LX2,LY2,LZ2,KX2,KY2,KZ2)
*****23
* CONSTRUCCION DE LOS VECTORES FRONT.DIRICHLET (FU)
CALL VECTFU(FU1,LS1,MS1,NS1,NMS1,PG1,LX1,LY1,LZ1,G,
& ROW,RON,LAMDW1,LAMDN1,NE1)
CALL VECTFU(FU2,LS2,MS2,NS2,NMS2,PG2,LX2,LY2,LZ2,G,
& ROW,RON,LAMDW2,LAMDN2,NE2)
*****24
* CALCULO DE LA MATRIZ AULT=AU+R*MLTL+R*MTTT
CALL MATAULT(NRAULT1,NCAULT1,AULT1,NRAU1,NCAU1,AU1,
& NRMLTL1,NCMLTL1,MLTL1,NRMTTT1,NCMTTT1,MTTT1,AXB1,NMS1,RU1)
CALL MATAULT(NRAULT2,NCAULT2,AULT2,NRAU2,NCAU2,AU2,
& NRMLTL2,NCMLTL2,MLTL2,NRMTTT2,NCMTTT2,MTTT2,AXB2,NMS2,RU2)
*****25
* CALCULO DEL VECTOR PROYECCION "PYU"
10 CALL CALPY(PYU1,NRMT1,NCMT1,MT1,PI1,ALFU1,NFI1,NMS1,RU1,
& MFA1,NFA1,MFB1,LFB1,MFC1,NFC1,MFD1,LFD1,LFE1,NFE1,LFF1,NFF1,
& NBBA2,NFI2,NMS2,NRMT2,NCMT2,MT2,PI2,ALFU2,2,
& NCCB0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NFFC0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NAAD0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NEEE0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NDDF0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0)
CALL CALPY(PYU2,NRMT2,NCMT2,MT2,PI2,ALFU2,NFI2,NMS2,RU2,
& MFA2,NFA2,MFB2,LFB2,MFC2,NFC2,MFD2,LFD2,LFE2,NFE2,LFF2,NFF2,
& NBBA0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NCCB0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NFFC1,NFI1,NMS1,NRMT1,NCMT1,MT1,PI1,ALFU1,1,
& NAAD0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NEEE0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NDDF0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0)
*****26
* CALCULO DEL VECTOR FULT=FU-MLT(LAMDA+R*QGP)-MTT(PI-PYU)
NITL=0
CALL VECTFULT(FULT1,FU1,NRMLT1,NCMLT1,MLT1,LAMDA1,QGP1,
& NRMTT1,NCMTT1,MTT1,PI1,PYU1,NMS1,NE1,NFI1,RU1)
CALL VECTFULT(FULT2,FU2,NRMLT2,NCMLT2,MLT2,LAMDA2,QGP2,

```

```

& NRMTT2,NCMTT2,MTT2,PI2,PYU2,NMS2,NE2,NFI2,RU2)
*****27
* CALCULO DEL VECTOR VELOCIDAD ALFU
CALL CALFU(ALFU1,DIFU1,DIFUU1,NRAULT1,NCAULT1,AULT1,FULT1,
& NRIAULT1,NRIU1,NMS1)
CALL CALFU(ALFU2,DIFU2,DIFUU2,NRAULT2,NCAULT2,AULT2,FULT2,
& NRIAULT2,NRIU2,NMS2)
*****28
* CALCULO DEL VECTOR PRESION INTERIOR "LAMDA"
CALL PRES(LAMDA1,DIFL1,DIFLL1,NRML1,NCML1,ML1,ALFU1,
& QGP1,NMS1,NE1,RU1)
CALL PRES(LAMDA2,DIFL2,DIFLL2,NRML2,NCML2,ML2,ALFU2,
& QGP2,NMS2,NE2,RU2)
*****29
* CALCULO DEL VECTOR PROYECCION "PYU"
CALL CALPY(PYU1,NRMT1,NCMT1,MT1,PI1,ALFU1,NFI1,NMS1,RU1,
& MFA1,NFA1,MFB1,LFB1,MFC1,NFC1,MFD1,LFD1,LFE1,NFE1,LFF1,NFF1,
& NBBA2,NFI2,NMS2,NRMT2,NCMT2,MT2,PI2,ALFU2,2,
& NCCB0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NFFC0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NAAD0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NEEE0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NDDF0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0)
CALL CALPY(PYU2,NRMT2,NCMT2,MT2,PI2,ALFU2,NFI2,NMS2,RU2,
& MFA2,NFA2,MFB2,LFB2,MFC2,NFC2,MFD2,LFD2,LFE2,NFE2,LFF2,NFF2,
& NBBA0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NCCB0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NFFC1,NFI1,NMS1,NRMT1,NCMT1,MT1,PI1,ALFU1,1,
& NAAD0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NEEE0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0,
& NDDF0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,PI0,ALFU0,0)
*****30
* CALCULO DE PRESION DE FRONTERA INTERNA "PI"
**PARA CALCULAR PI (CARAS A,B,C,D,E,F)(0=SE CALC.1=NO SE CALC. PI)
CALL PRESFI(PI1,DIFP1,DIFPP1,NRMT1,NCMT1,MT1,ALFU1,PYU1,
& NFI1,NMS1,RU1,MFA1,NFA1,MFB1,LFB1,MFC1,NFC1,MFD1,LFD1,
& LFE1,NFE1,LFF1,NFF1,0,1,1,1,1,1)
CALL PRESFI(PI2,DIFP2,DIFPP2,NRMT2,NCMT2,MT2,ALFU2,PYU2,
& NFI2,NMS2,RU2,MFA2,NFA2,MFB2,LFB2,MFC2,NFC2,MFD2,LFD2,
& LFE2,NFE2,LFF2,NFF2,1,1,0,1,1,1)
*****31
DIFU=SQRT(DIFU1+DIFU2)/
& SQRT(DIFUU1+DIFUU2)
DIFL=SQRT(DIFL1+DIFL2)/
& SQRT(DIFLL1+DIFLL2)
DIFP=SQRT(DIFP1+DIFP2)/
& SQRT(DIFPP1+DIFPP2)

```

```

NITP=NITP+1
WRITE(*,1010)NITP,DIFP,DIFL,DIFU,NITT
IF(DIFL.GT.(1.0E-15).AND.NITP.LT.(20.0E+3))THEN
GOTO 10
ENDIF
1010 FORMAT(' NITP,DIFP,DIFL,DIFU ',I5,3E15.5,I5)
*****
* FIN DEL MODELO TIPO INCOMPRESIBLE
* INICIA MODELO TIPO ADVECCION-DIFUSION
NITS=0
* CALCULO PRESION CAPILAR PC(SAT) Y SU DERIVADA PPC(SAT)
30 CALL CALPPC(PPC1,PC1,SAT1,SRW,SRN,NE1)
CALL CALPPC(PPC2,PC2,SAT2,SRW,SRN,NE2)
*****32
* CONSTRUCCION DE LOS VECTORES FRONT.DIRICHLET FW=FW(PPC)
CALL VECTFW(FW1,LS1,MS1,NS1,NMS1,SG1,LX1,LY1,LZ1,G,
& ROW,RON,PPC1,NE1)
CALL VECTFW(FW2,LS2,MS2,NS2,NMS2,SG2,LX2,LY2,LZ2,G,
& ROW,RON,PPC2,NE2)
*****33
* CALCULO DE 1/PL,LAMDW,LAMDN,KRW,KRN
CALL LAMDWN(PL1,LAMDW1,LAMDN1,KRW1,KRN1,SAT1,SRW,SRN,
& MUW,MUN,NE1)
CALL LAMDWN(PL2,LAMDW2,LAMDN2,KRW2,KRN2,SAT2,SRW,SRN,
& MUW,MUN,NE2)
*****34
* CALCULO DEL PARAMETRO (PD) PD=PD(LAMDN*LAMDW*PPC/PL)
CALL CALPD(PD1,PL1,LAMDN1,LAMDW1,PPC1,NE1)
CALL CALPD(PD2,PL2,LAMDN2,LAMDW2,PPC2,NE2)
*****35
* CONSTRUCCION DE LAS MATRICES (AW) AW=AW(PD)
CALL MATAW(AW1,NRAW1,NCAW1,PD1,LS1,MS1,NS1,NMS1,NE1,
& LX1,LY1,LZ1,KX1,KY1,KZ1)
CALL MATAW(AW2,NRAW2,NCAW2,PD2,LS2,MS2,NS2,NMS2,NE2,
& LX2,LY2,LZ2,KX2,KY2,KZ2)
*****36
* CALCULO DE LA MATRIZ AWLT=AW+RU1*LTML+RU1*MTTT AWLT=AWLT(AW)
CALL MATAWLT(NRAWLT1,NCAWLT1,AWLT1,NRAW1,NCAW1,AW1,
& NRLTML1,NCLTML1,LTML1,NRMTTT1,NCMTTT1,MTTT1,AXB1,NMS1,RW1)
CALL MATAWLT(NRAWLT2,NCAWLT2,AWLT2,NRAW2,NCAW2,AW2,
& NRLTML2,NCLTML2,LTML2,NRMTTT2,NCMTTT2,MTTT2,AXB2,NMS2,RW2)
*****37
* CALCULO DEL VECTOR DE FUENTES QGS=QGS(LAMDN,LAMDW)
CALL VECTQGS(QGS1,LAMDN1,LAMDW1,QGW1,QGN1,LS1,MS1,NS1,NE1,
& LX1,LY1,LZ1)
CALL VECTQGS(QGS2,LAMDN2,LAMDW2,QGW2,QGN2,LS2,MS2,NS2,NE2,
& LX2,LY2,LZ2)

```

*****38

* CALCULO DEL VECTOR CS=CS(ALFW,ALFU,PD,PPC,PL,KRW,SAT)
CALL VECTCS(CS1,KX1,KY1,KZ1,ALFW1,ALFU1,PD1,LX1,LY1,LZ1,
& ROW,RON,G,PPC1,KRW1,KRN1,SAT1,MUW,MUN,SRW,SRN,
& LS1,MS1,NS1,NMS1,NE1)
CALL VECTCS(CS2,KX2,KY2,KZ2,ALFW2,ALFU2,PD2,LX2,LY2,LZ2,
& ROW,RON,G,PPC2,KRW2,KRN2,SAT2,MUW,MUN,SRW,SRN,
& LS2,MS2,NS2,NMS2,NE2)

*****39

* CALCULO DEL VECTOR PROYECCION "PYW"
CALL CALPY(PYW1,NRMT1,NCMT1,MT1,SATF1,ALFW1,NFI1,NMS1,RW1,
& MFA1,NFA1,MFB1,LFB1,MFC1,NFC1,MFD1,LFD1,LFE1,NFE1,LFF1,NFF1,
& NBBA2,NFI2,NMS2,NRMT2,NCMT2,MT2,SATF2,ALFW2,2,
& NCCB0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NFFC0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NAAD0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NEEE0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NDDF0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0)
CALL CALPY(PYW2,NRMT2,NCMT2,MT2,SATF2,ALFW2,NFI2,NMS2,RW2,
& MFA2,NFA2,MFB2,LFB2,MFC2,NFC2,MFD2,LFD2,LFE2,NFE2,LFF2,NFF2,
& NBBA0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NCCB0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NFFC1,NFI1,NMS1,NRMT1,NCMT1,MT1,SATF1,ALFW1,1,
& NAAD0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NEEE0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NDDF0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0)

*****40

* CALCULO DEL VECTOR FWLT=FW-MLT(SAT+RU1*MAS*(QGS-CS))-MTT(SATF-PYW)

CALL VECTFWLT(FWLT1,FW1,NRMLT1,NCMLT1,MLT1,SAT1,QGS1,CS1,MAS1,
& NRMTT1,NCMTT1,MTT1,SATF1,PYW1,NMS1,NE1,NFI1,RW1,AXA1)
CALL VECTFWLT(FWLT2,FW2,NRMLT2,NCMLT2,MLT2,SAT2,QGS2,CS2,MAS2,
& NRMTT2,NCMTT2,MTT2,SATF2,PYW2,NMS2,NE2,NFI2,RW2,AXA2)

*****41

* CALCULO DEL VECTOR FLUJO SAT. (ALFW)
CALL CALFW(ALFW1,DIFW1,DIFWW1,NRAWLT1,NCAWLT1,AWLT1,FWLT1,
& NRIAWLT1,NRIW1,NMS1)
CALL CALFW(ALFW2,DIFW2,DIFWW2,NRAWLT2,NCAWLT2,AWLT2,FWLT2,
& NRIAWLT2,NRIW2,NMS2)

*****42

* CALCULO DEL VECTOR SATURACION INTERIOR SAT
CALL CSAT(SAT1,SATT1,DIFS1,DIFSS1,NRML1,NCML1,ML1,ALFW1,QGS1,
& MAS1,CS1,NMS1,NE1,RW1)
CALL CSAT(SAT2,SATT2,DIFS2,DIFSS2,NRML2,NCML2,ML2,ALFW2,QGS2,
& MAS2,CS2,NMS2,NE2,RW2)

*****43

* CALCULO DEL VECTOR PROYECCION "PYW"


```

CALL CALPY(PYW1,NRMT1,NCMT1,MT1,SATF1,ALFW1,NFI1,NMS1,RW1,
& MFA1,NFA1,MFB1,LFB1,MFC1,NFC1,MFD1,LFD1,LFE1,NFE1,LFF1,NFF1,
& NBBA2,NFI2,NMS2,NRMT2,NCMT2,MT2,SATF2,ALFW2,2,
& NCCB0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NFFC0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NAAD0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NEEE0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NDDF0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0)
CALL CALPY(PYW2,NRMT2,NCMT2,MT2,SATF2,ALFW2,NFI2,NMS2,RW2,
& MFA2,NFA2,MFB2,LFB2,MFC2,NFC2,MFD2,LFD2,LFE2,NFE2,LFF2,NFF2,
& NBBA0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NCCB0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NFFC1,NFI1,NMS1,NRMT1,NCMT1,MT1,SATF1,ALFW1,1,
& NAAD0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NEEE0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0,
& NDDF0,NFI0,NMS0,NRMT0,NCMT0,MT0,SATF0,ALFW0,0)
*****44
* CALCULO SATURACION DE FRONTERA INTERNA (SATF)
**PARA CALC. SATF (CARAS A,B,C,D,E,F)(0=SE CALC.SATF, 1=NO SE CALC.)
CALL CSATF(SATF1,DIFF1,DIFFF1,NRMT1,NCMT1,MT1,ALFW1,PYW1,
& NFI1,NMS1,RW1,MFA1,NFA1,MFB1,LFB1,MFC1,NFC1,MFD1,LFD1,
& LFE1,NFE1,LFF1,NFF1,0,1,1,1,1,1)
CALL CSATF(SATF2,DIFF2,DIFFF2,NRMT2,NCMT2,MT2,ALFW2,PYW2,
& NFI2,NMS2,RW2,MFA2,NFA2,MFB2,LFB2,MFC2,NFC2,MFD2,LFD2,
& LFE2,NFE2,LFF2,NFF2,1,1,0,1,1,1)
*****45
DIFW=SQRT(DIFW1+DIFW2)/
& SQRT(DIFWW1+DIFWW2) !ERROR FLUJ.SAT.
DIFS=SQRT(DIFS1+DIFS2)/
& SQRT(DIFSS1+DIFSS2) !ERROR EN SATURACION
DIFF=SQRT(DIFF1+DIFF2)/
& SQRT(DIFFF1+DIFFF2) !ERROR SAT.F.I.
NITS=NITS+1
WRITE(*,1011)NITS,DIFF,DIFS,DIFW,NITT
IF(DIFS.GT.(1.0E-15).AND.NITS.LT.(2E+3))THEN
GOTO 30
ENDIF
1011 FORMAT(' NITS DIFF DIFS DIFW ',I5,3E15.5,I5)
*****
CALL TRANSF(AFU1,AFW1,ALFU1,ALFW1,LAMDW1,LAMDN1,
& LS1,MS1,NS1,NMS1,NE1)
CALL TRANSF(AFU2,AFW2,ALFU2,ALFW2,LAMDW2,LAMDN2,
& LS2,MS2,NS2,NMS2,NE2)
*****46
* CALCULO DE PRESIONES Y SATURACIONES MAXIMA Y MINIMA
PMIN=1.0E+15; PMAX=-1.0E+15; SMIN=1.0E+15; SMAX=-1.0E+15
CALL PMINPMAX(LAMDA1,NE1,PMIN,PMAX,SAT1,SMIN,SMAX)

```

```

CALL PMINPMAX(LAMDA2,NE2,PMIN,PMAX,SAT2,SMIN,SMAX)
*****47
DX=1.D0; DY=1.D0; DZ=1.D0
OPEN (UNIT=1,FILE='FORT1')
WRITE(1,*)NSB
WRITE(1,*)PMIN,PMAX,' POS-PRES: VEL.T-PRES.G.'
CALL ESCRIBE(LAMDA1,ALFU1,LS1,MS1,NS1,LX1,LY1,LZ1,NMS1,NE1,
& 0.D0,0.D0,0.D0)
CALL ESCRIBE(LAMDA2,ALFU2,LS2,MS2,NS2,LX2,LY2,LZ2,NMS2,NE2,
& LX1+DX,0.D0,0.D0)
*****48
CLOSE(UNIT=1)
OPEN (UNIT=1,FILE='FORT2')
WRITE(1,*)NSB
WRITE(1,*)SMIN,SMAX,' POS-SAT: FLUJ.SAT-SAT '
CALL ESCRIBE(SAT1,ALFW1,LS1,MS1,NS1,LX1,LY1,LZ1,NMS1,NE1,
& 0.D0,0.D0,0.D0)
CALL ESCRIBE(SAT2,ALFW2,LS2,MS2,NS2,LX2,LY2,LZ2,NMS2,NE2,
& LX1+DX,0.D0,0.D0)
*****49
CLOSE(UNIT=1)
OPEN (UNIT=1,FILE='FORT3')
WRITE(1,*)NSB
WRITE(1,*)SMIN,SMAX,' POS-SAT: FLUJ.RESID-SAT '
CALL ESCRIBE(SAT1,AFU1,LS1,MS1,NS1,LX1,LY1,LZ1,NMS1,NE1,
& 0.D0,0.D0,0.D0)
CALL ESCRIBE(SAT2,AFU2,LS2,MS2,NS2,LX2,LY2,LZ2,NMS2,NE2,
& LX1+DX,0.D0,0.D0)
*****50
CLOSE(UNIT=1)
OPEN (UNIT=1,FILE='FORT4')
WRITE(1,*)NSB
WRITE(1,*)1.D0-SMAX,1.D0-SMIN,' POS-SAT: (VEL.F.R-SAT.F.R) '
CALL ESCRIBEE(SAT1,AFW1,LS1,MS1,NS1,LX1,LY1,LZ1,NMS1,NE1,
& 0.D0,0.D0,0.D0)
CALL ESCRIBEE(SAT2,AFW2,LS2,MS2,NS2,LX2,LY2,LZ2,NMS2,NE2,
& LX1+DX,0.D0,0.D0)
*****51
CLOSE(UNIT=1)
OPEN(UNIT=1,FILE='SALVA')
CALL SALVA(LAMDA1,SAT1,ALFU1,ALFW1,PI1,SATF1,NE1,NMS1,NFI1,NITT)
CALL SALVA(LAMDA2,SAT2,ALFU2,ALFW2,PI2,SATF2,NE2,NMS2,NFI2,NITT)
CLOSE(UNIT=1)
*****52
NITT=NITT+1
IF(NITT.LT.501)GOTO 20
END

```

Capítulo 6

RESULTADOS DEL MODELO BIFÁSICO

6.1 RESULTADOS

En este capítulo se presentan los resultados de la experimentación numérica realizada para el problema de flujo bifásico en medios porosos, con base en el modelo computacional desarrollado en este trabajo. Los resultados que se muestran corresponden a dos diferentes simulaciones, considerando una fase acuosa y una no-acuosa, de acuerdo a lo siguiente.

1. Un sistema compuesto por cinco subdominios con una condición de frontera externa tipo Neumann de velocidad total normal igual a cero y flujo de saturación normal también igual a cero, una fuente, un sumidero, saturaciones iniciales $s_w = 0.8$ y $s_n = 0.2$.
2. Un sistema compuesto por dos subdominios con una condición de frontera externa tipo Neumann igual a cero, y una condición de frontera externa tipo Dirichlet de presión global prescrita y saturación prescrita, un sumidero, saturaciones iniciales $s_w = 0.8$ y $s_n = 0.2$.

Cada experimento se presenta en una sección por separado, mostrando la evolución espacial y temporal de los campos físicos velocidad-saturación para cada una de las fases, obtenidos a partir de los resultados de los modelos (\mathbf{u}, p) y (\mathbf{w}, s) , con base en las relaciones

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_w &= \lambda_w \mathbf{u} + \mathbf{w}, \\ \mathbf{u}_n &= \lambda_n \mathbf{u} - \mathbf{w}, \\ s_w + s_n &= 1, \quad s = s_w.\end{aligned}$$

Las mallas de elemento finito que se utilizaron para discretizar espacialmente cada subdominio son conformes por subdominio, y los correspondientes elementos finitos son paralelepípedos. De esta manera, para discretizar un subdominio, basta con indicar cuantos planos se trazan en las direcciones coordenadas (x, y, z) , para conocer el número de elementos finitos en que se dividió un subdominio. Por ejemplo, si se trazan l_s planos en la dirección x , m_s en la dirección y y n_s en la dirección z , el número de elementos finitos NE en que se ha dividido el subdominio es, $NE = l_s \times m_s \times n_s$.

6.2 PRIMER EXPERIMENTO

En esta simulación se considera un sistema compuesto por cinco subdominios, numerados de izquierda a derecha. Las dimensiones espaciales de cada subdominio son las siguientes.

Subdominio	$L_x(m)$	$L_y(m)$	$L_z(m)$
1	20	20	20,
2	20	20	20,
3	20	30	20,
4	20	20	20,
5	30	20	20.

La discretización espacial de cada subdominio es la siguiente.

Subdominio	l_s	m_s	n_s
1	5	5	6,
2	5	6	7,
3	6	9	5,
4	5	5	5,
5	9	6	5.

Las mallas de frontera interna tienen una discretización espacial variable, pero siempre entre (6×6) , (6×5) y (5×5) para las caras que tengan un subdominio vecino, y de 1×1 en donde no se tenga un subdominio vecino.

Las permeabilidades absolutas del medio poroso que se usaron para este experimento fueron:

Subdominio	$K_x(m^2)$	$K_y(m^2)$	$K_z(m^2)$
1	2.00×10^{-12}	1.25×10^{-12}	1.00×10^{-12} ,
2	1.25×10^{-12}	2.00×10^{-12}	1.00×10^{-12} ,
3	1.25×10^{-12}	2.00×10^{-12}	1.00×10^{-12} ,
4	2.00×10^{-12}	1.25×10^{-12}	1.00×10^{-12} ,
5	2.00×10^{-12}	1.25×10^{-12}	1.00×10^{-12} .

Las propiedades físicas de las fases acuosa y no-acuosa utilizadas son las siguientes.

Fase	densidad (Kg/m^3)	viscosidad (Pa-s)
acuosa	1000	0.001,
no-acuosa	700	0.010.

Las condiciones de frontera externa para todos los subdominios son tipo Neumann de velocidad total normal $\mathbf{u}_{n_e} = 0$ y flujo de saturación normal $\mathbf{w}_{n_e} = 0$. La saturación residual de cada fase se estableció en $s_{rw} = s_{rn} = 0.10$. Las correspondientes condiciones iniciales en cada subdominio son: $s_{w_e} = 0.80$ y $s_{n_e} = 0.20$.

Se prescribió una fuente en el primer subdominio con valor $\hat{q}_n = +0.005m^3/s$ y un sumidero en el quinto subdominio con valor $\hat{q} = -0.005m^3/s$. La fuente en este caso, está inyectando fluido de la fase no acuosa, y en el sumidero lo que se extrae depende de la saturación que se tenga en cada paso de tiempo. El paso de tiempo utilizado es $\Delta t = 10 \text{ min}$.

Los resultados de este experimento se muestran en las figuras 6.1-6.5. En la figura 6.1 se presentan los campos solución de los modelos (\mathbf{u}, p) y (\mathbf{w}, s) para $t = 1.0$ min y $t = 10.0$ días. No se presentan los campos solución para tiempos intermedios.

En las figuras 6.2-6.5, se presenta la evolución espacio-temporal de los campos físicos velocidad-saturación de la fase acuosa (\mathbf{u}_w, s_w) y velocidad-saturación de la fase no-acuosa (\mathbf{u}_n, s_n) para distintos tiempos.

6.3 SEGUNDO EXPERIMENTO

En esta simulación se considera un sistema compuesto por dos subdominios, numerados de izquierda a derecha. Las dimensiones de cada subdominio son las siguientes.

Subdominio	$L_x(m)$	$L_y(m)$	$L_z(m)$
1	20	20	20,
2	50	20	20.

La discretización espacial de cada subdominio es la siguiente.

Subdominio	l_s	m_s	n_s
1	5	6	5,
2	10	7	6.

La malla de frontera interna tiene una discretización espacial de 6×6 en la cara con el subdominio vecino, y de 1×1 en las demás caras.

Las permeabilidades absolutas del medio poroso que se usaron para este experimento fueron.

Subdominio	$K_x(m^2)$	$K_y(m^2)$	$K_z(m^2)$
1	3.33×10^{-12}	1.43×10^{-12}	1.00×10^{-12} ,
2	3.33×10^{-12}	1.43×10^{-12}	1.00×10^{-12} .

Las propiedades físicas de las fases acuosa y no-acuosa utilizadas son.

Fase	densidad (Kg/m^3)	viscosidad (Pa-s)
acuosa	1000	0.001,
no-acuosa	700	0.010.

Las condiciones de frontera externa para el primer subdominio son tipo Neumann de velocidad total normal $\mathbf{u}_{n_1} = 0$ y flujo de saturación normal $\mathbf{w}_{n_1} = 0$ en todas las caras excepto en la cara superior, en donde se tiene una condición de frontera externa tipo Dirichlet de presión global $p = 0$ y saturación $s_w = 0.11$. Las correspondientes al segundo subdominio son tipo Neumann de velocidad total normal $\mathbf{u}_{n_2} = 0$ y flujo de saturación normal $\mathbf{w}_{n_2} = 0$. La saturación residual de cada fase se estableció en $s_{rw} = 0.10$ para la fase acuosa y $s_{rn} = 0.10$ para la fase no-acuosa. Las correspondientes condiciones iniciales en cada subdominio son: $s_{w_e} = 0.80$ y $s_{n_e} = 0.20$.

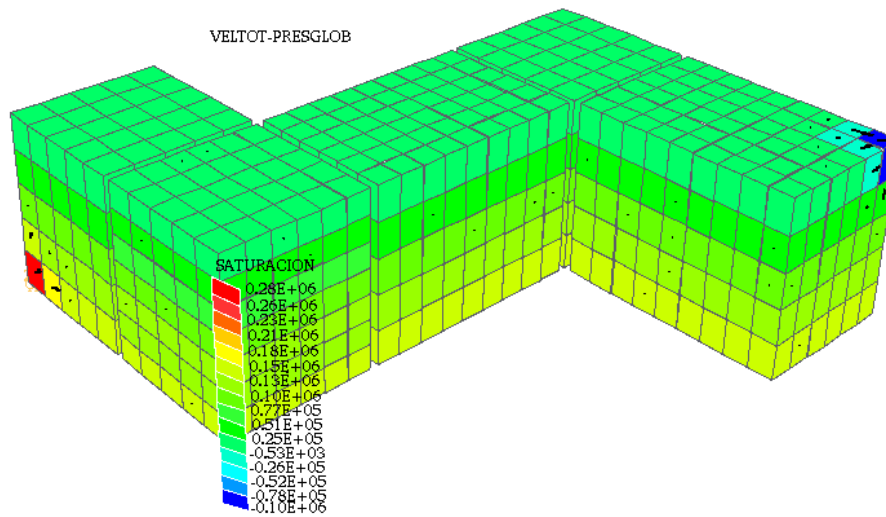
Se prescribió un sumidero en el segundo subdominio con valor $\hat{q} = -0.005m^3/s$. En este sumidero, lo que se extrae depende de la saturación que se tenga en cada paso de tiempo. El paso de tiempo utilizado es $\Delta t = 30 \text{ min}$.

Los resultados para este experimento se muestran en las figuras 6.6-6.9. En la figura 6.6 se presentan los campos solución de los modelos (\mathbf{u}, p) y (\mathbf{w}, s) para $t = 10.0 \text{ min}$ y $t = 40.0 \text{ días}$. No se presentan los campos solución para tiempos intermedios.

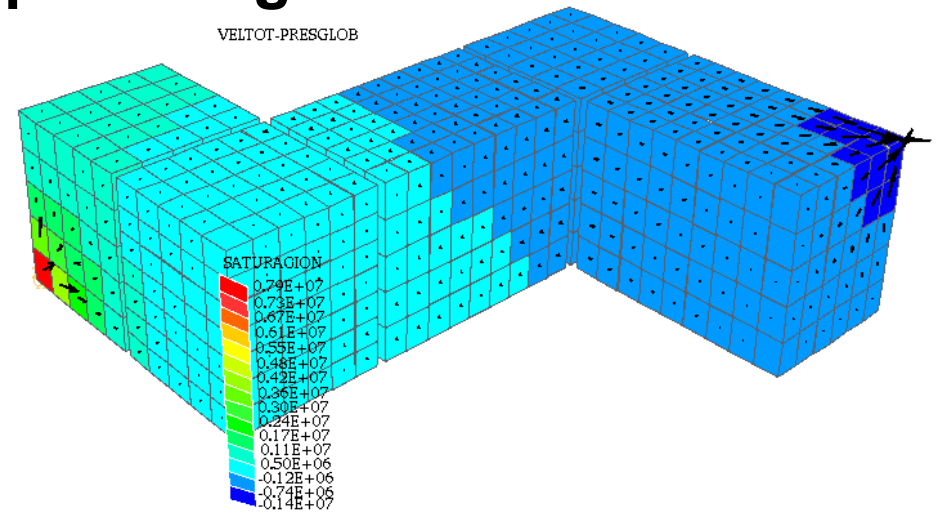
En las figuras 6.7-6.9, se presenta la evolución espacio-temporal de los campos físicos velocidad-saturación de la fase acuosa (\mathbf{u}_w, s_w) y velocidad-saturación de la fase no-acuosa (\mathbf{u}_n, s_n) para distintos tiempos.

Componentes del modelo para 5 subdominios

Velocidad total-presión global

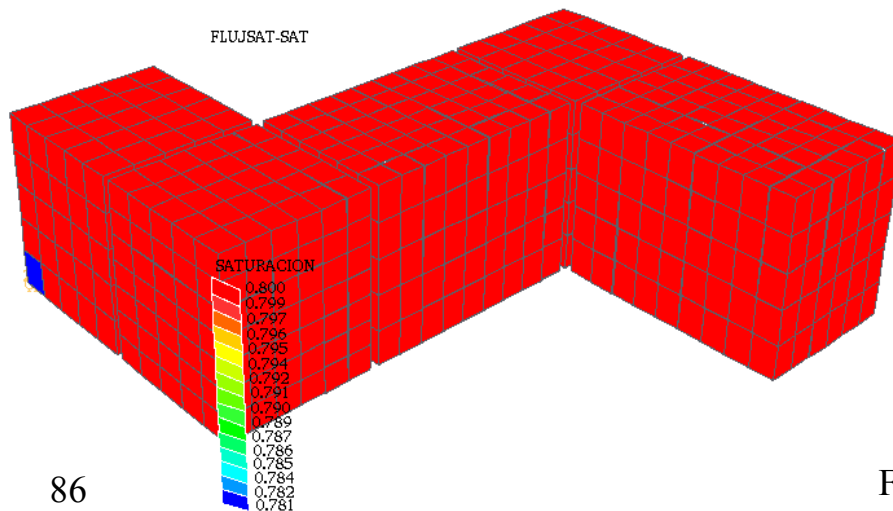


1 min



10 días

Flujo de saturación-saturación



86

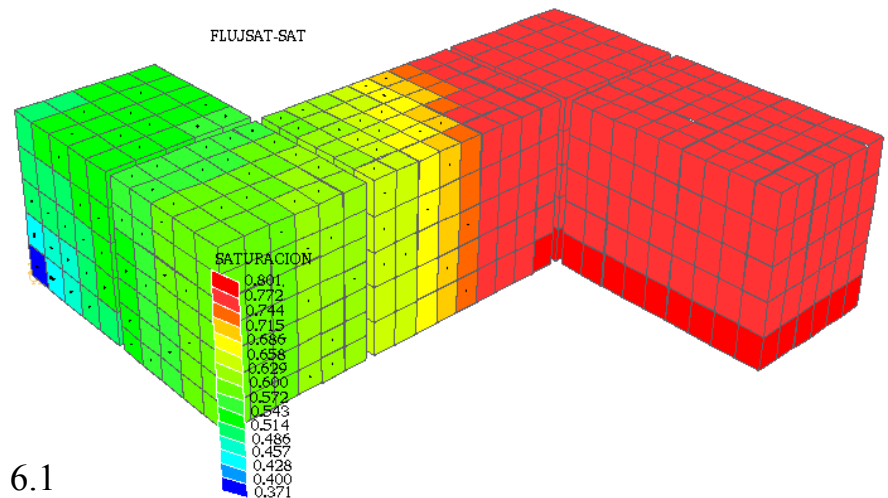
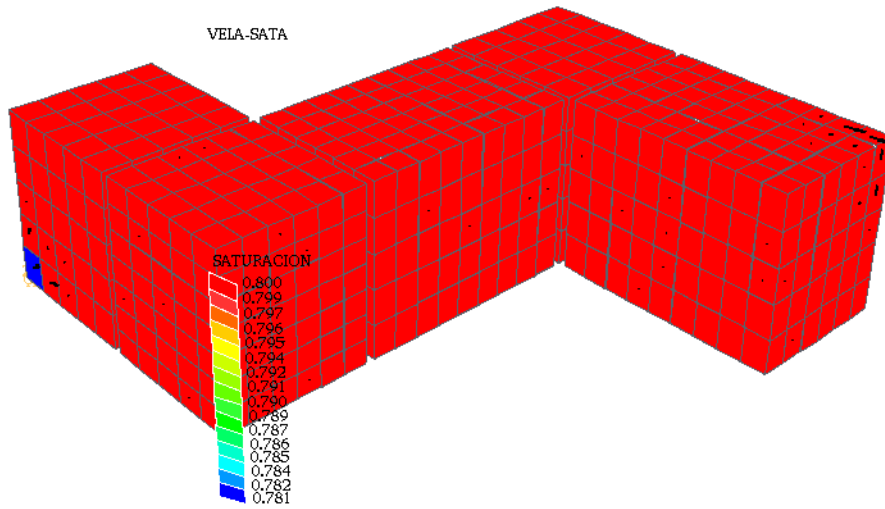


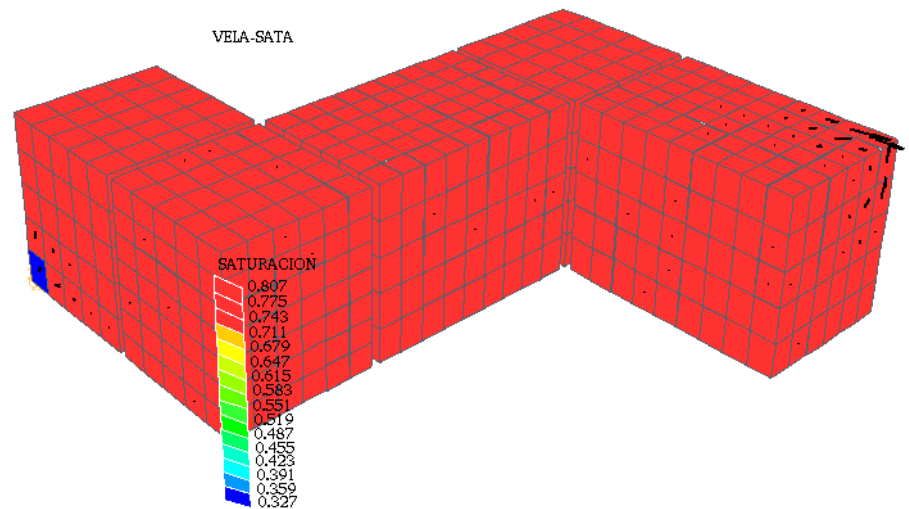
Fig. 6.1

Evolución espacio-temporal para 5 subdominios

velocidad-saturación fase acuosa

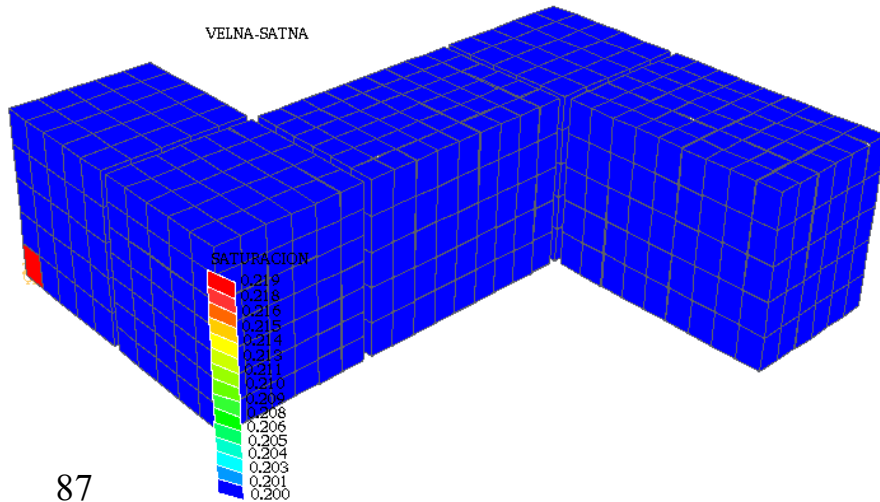


1 min



1 hora

velocidad-saturación fase no acuosa



87

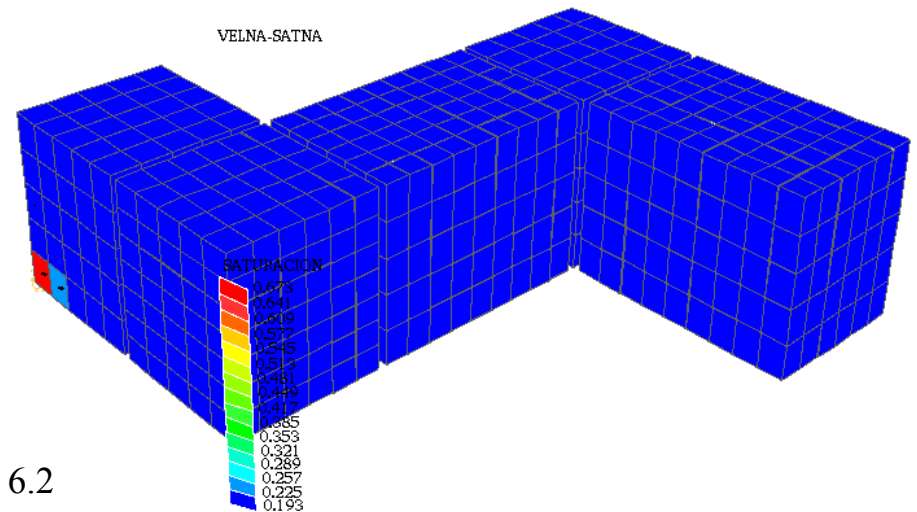
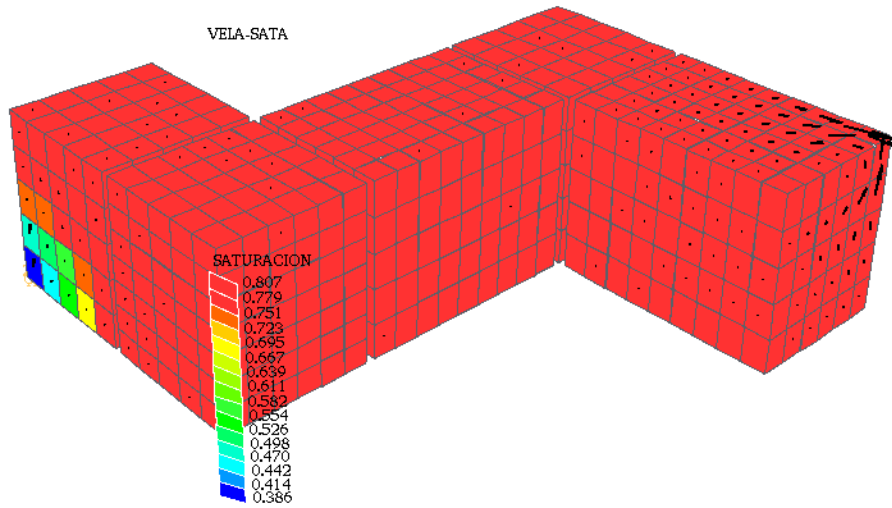


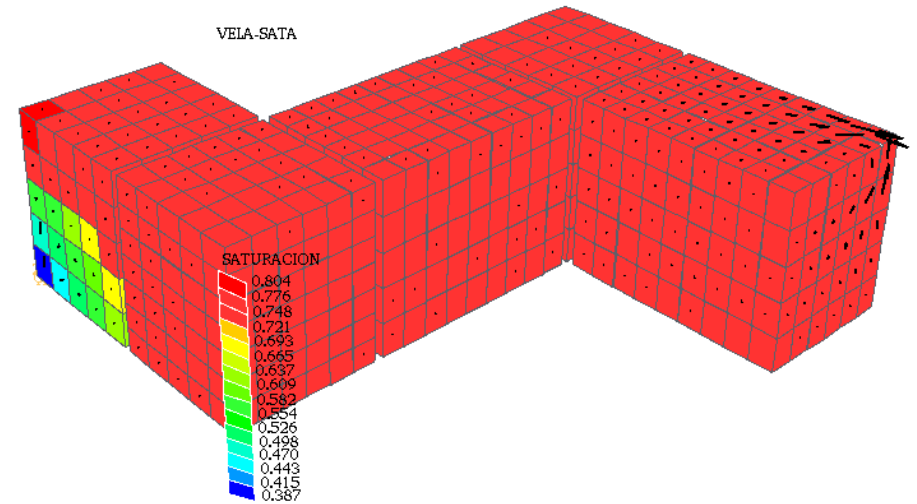
Fig. 6.2

Evolución espacio-temporal para 5 subdominios

velocidad-saturación fase acuosa

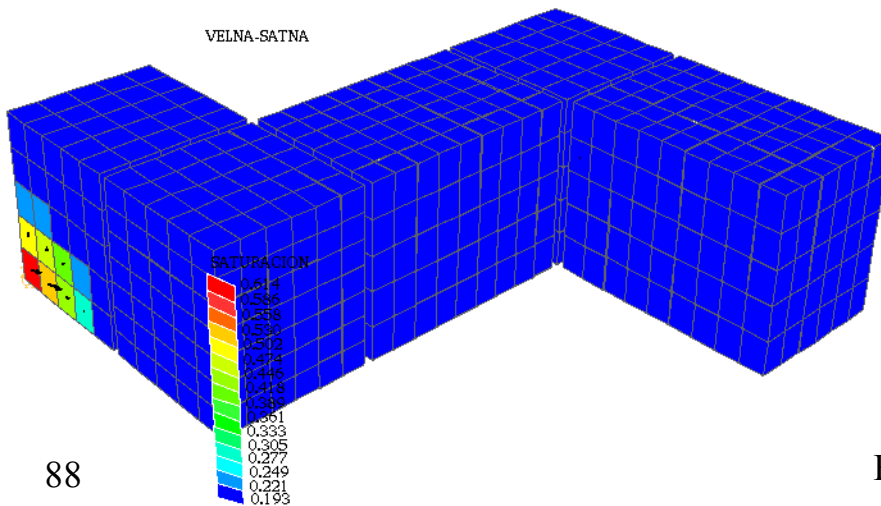


1/2 día



1 día

velocidad-saturación fase no acuosa



88

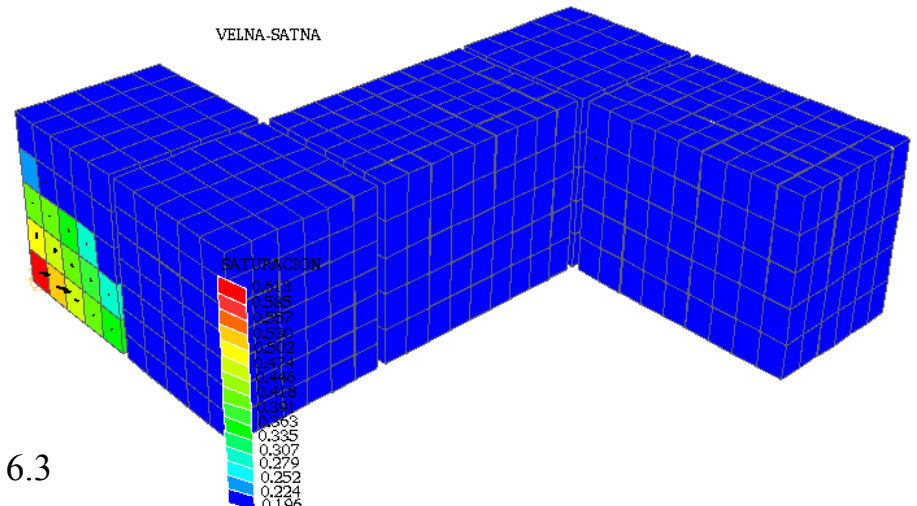
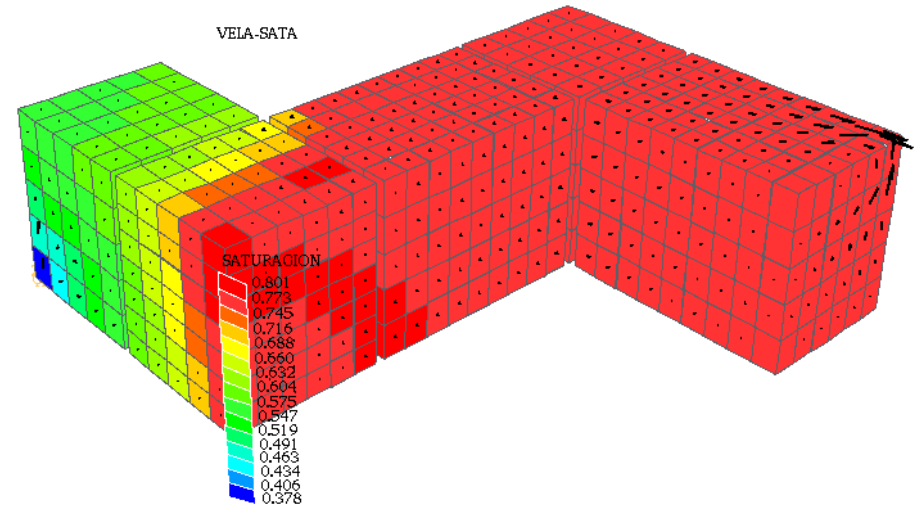
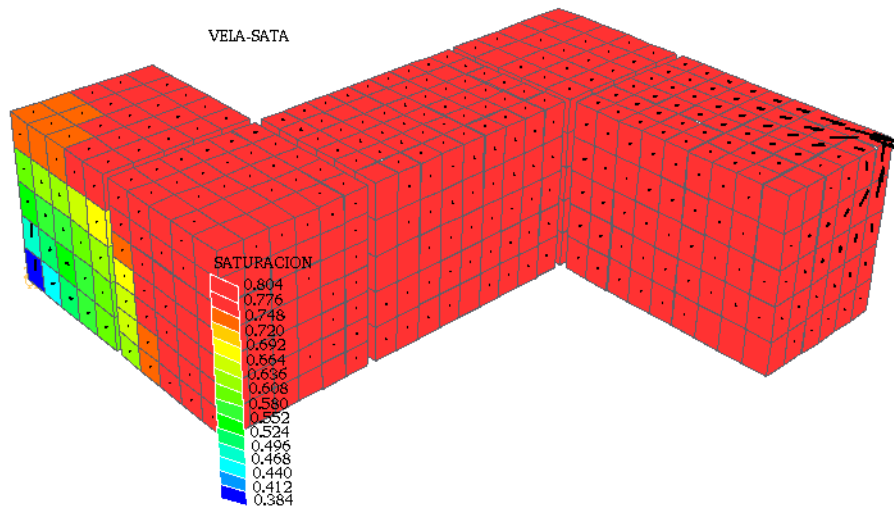


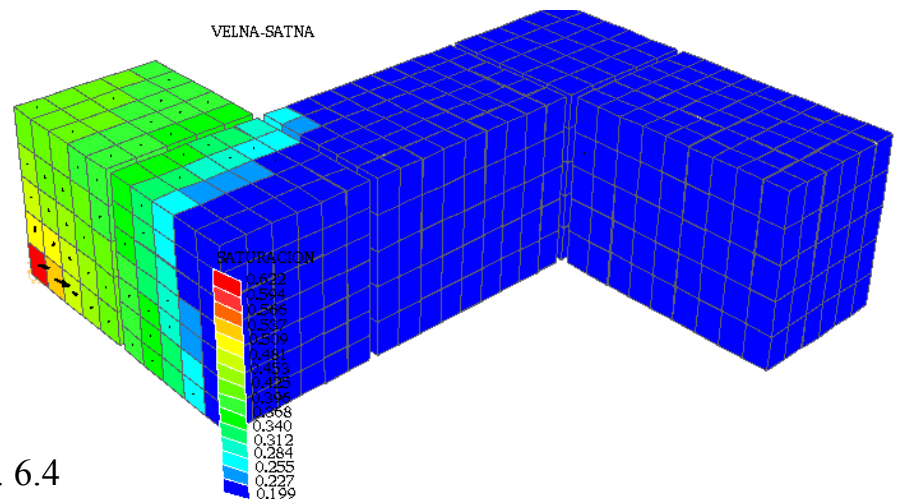
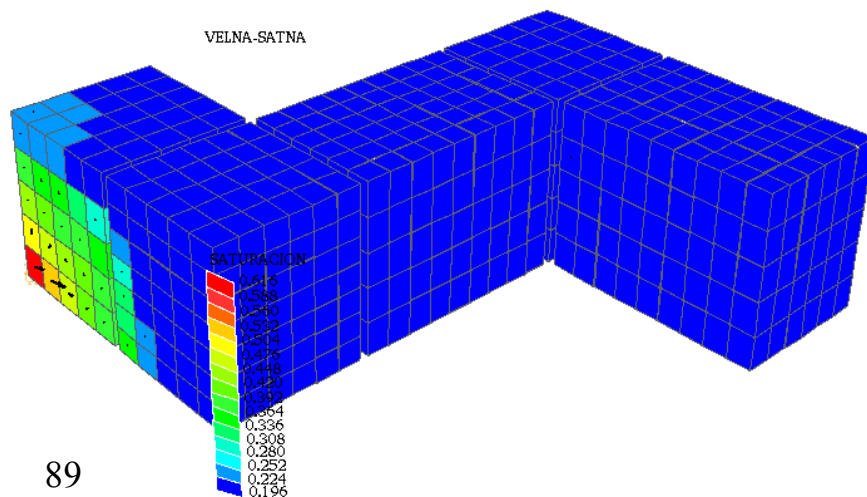
Fig. 6.3

Evolución espacio-temporal para 5 subdominios

velocidad-saturación fase acuosa

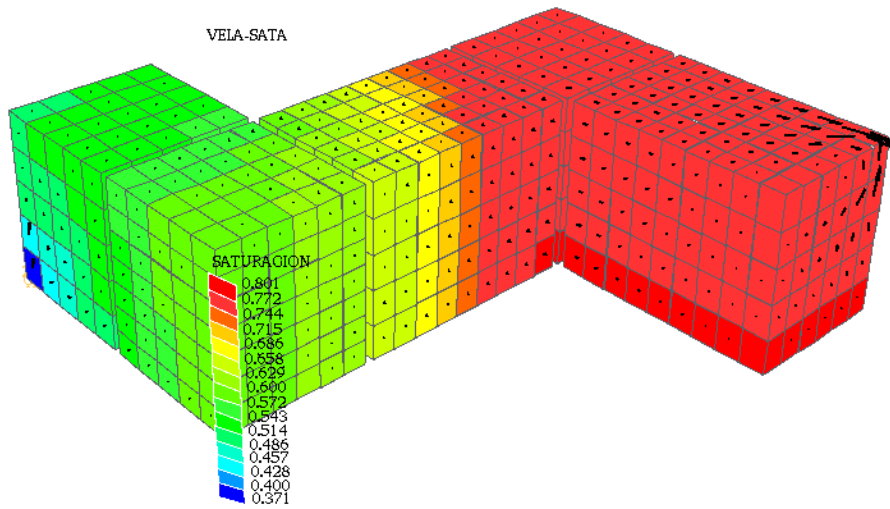


velocidad-saturación fase no acuosa

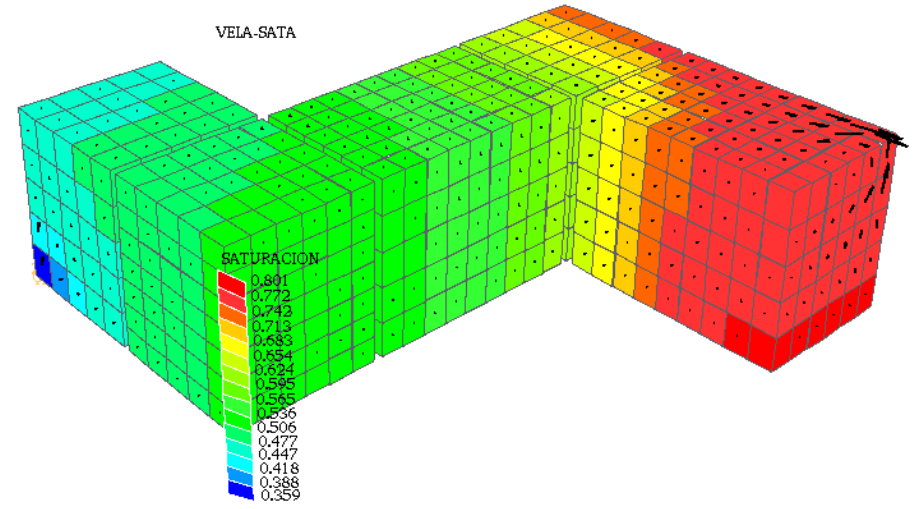


Evolución espacio-temporal para 5 subdominios

velocidad-saturación fase acuosa

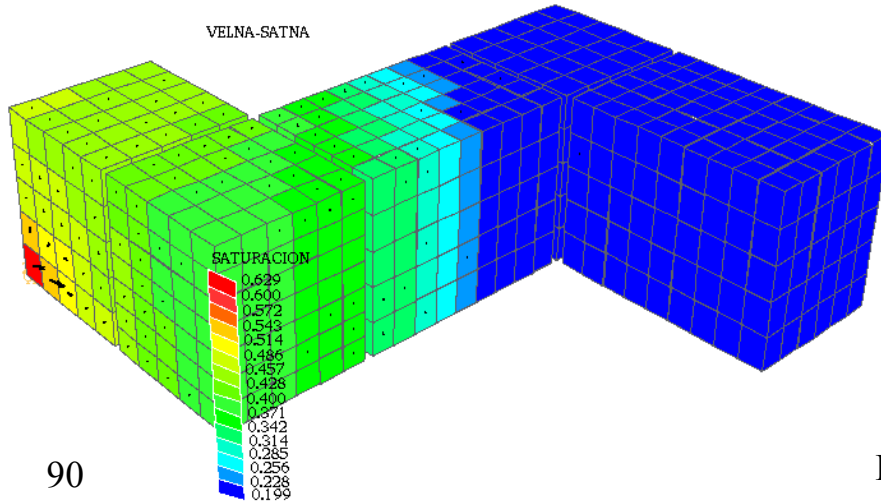


10 días



20 días

velocidad-saturación fase no acuosa



90

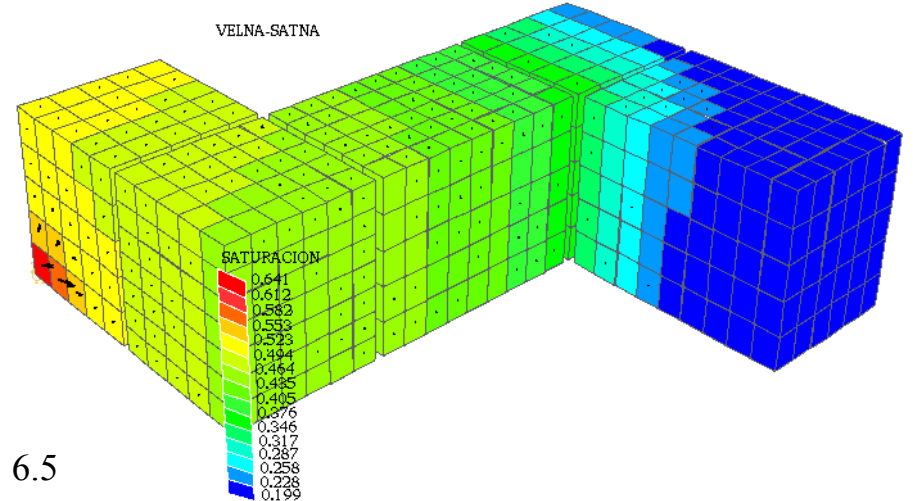
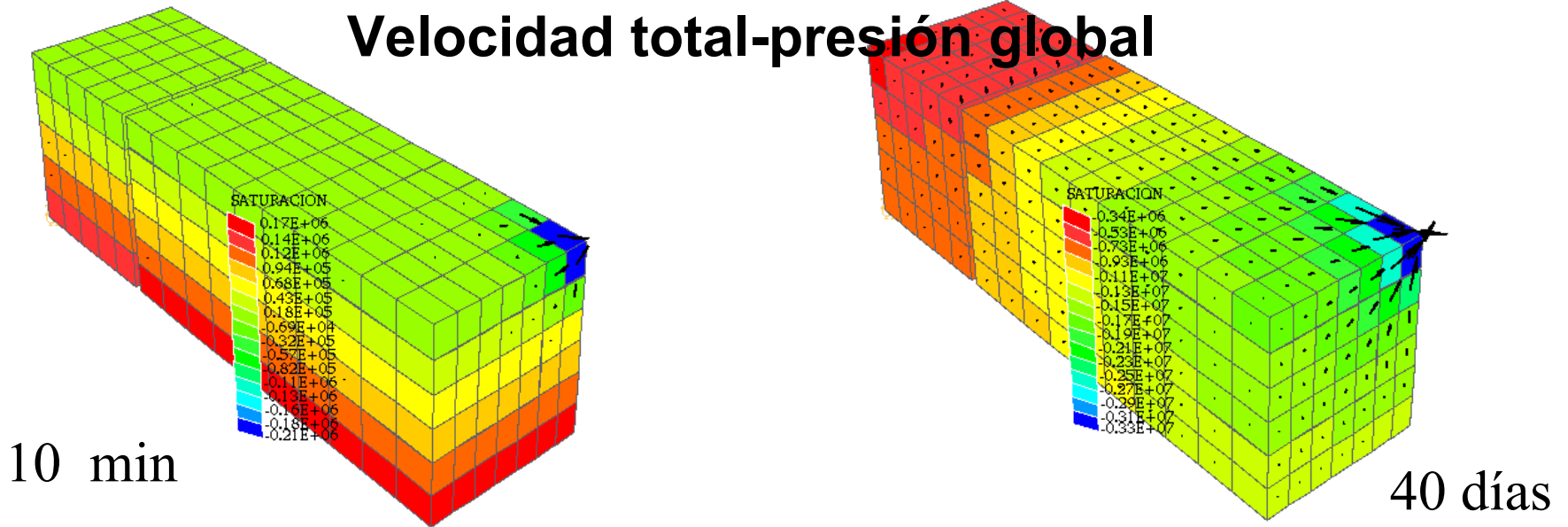


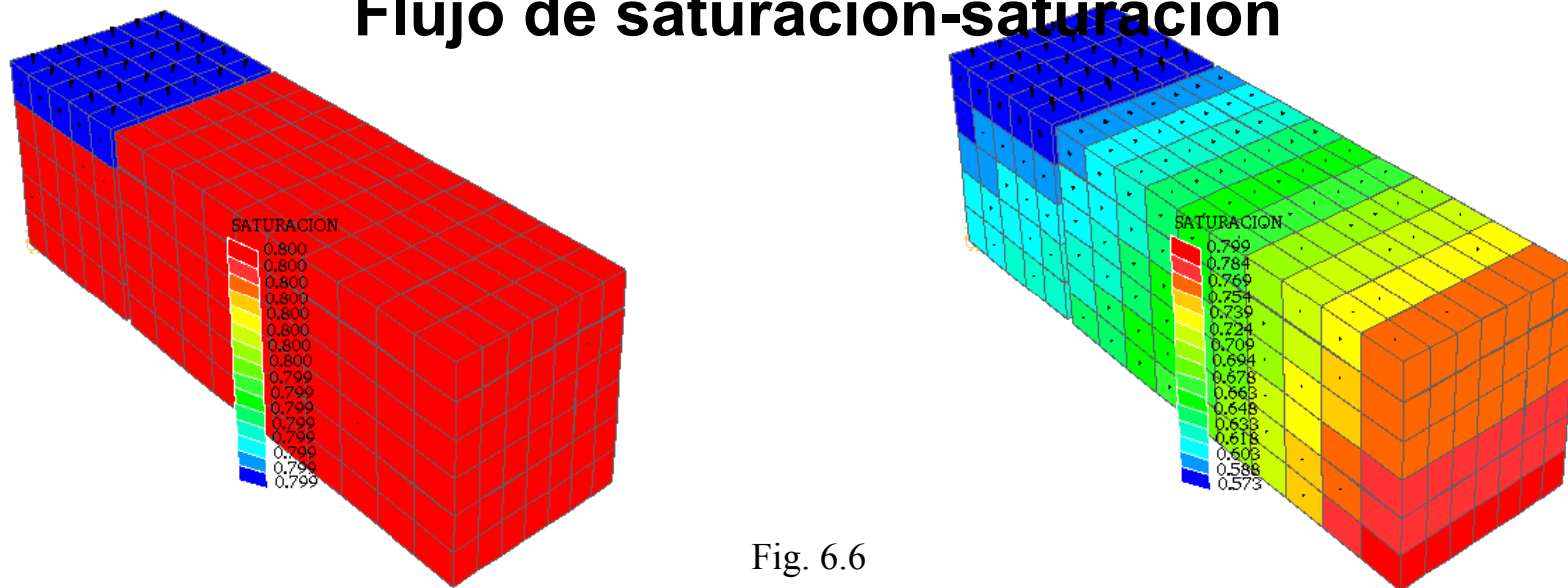
Fig. 6.5

Componentes del modelo para 2 subdominios

Velocidad total-presión global

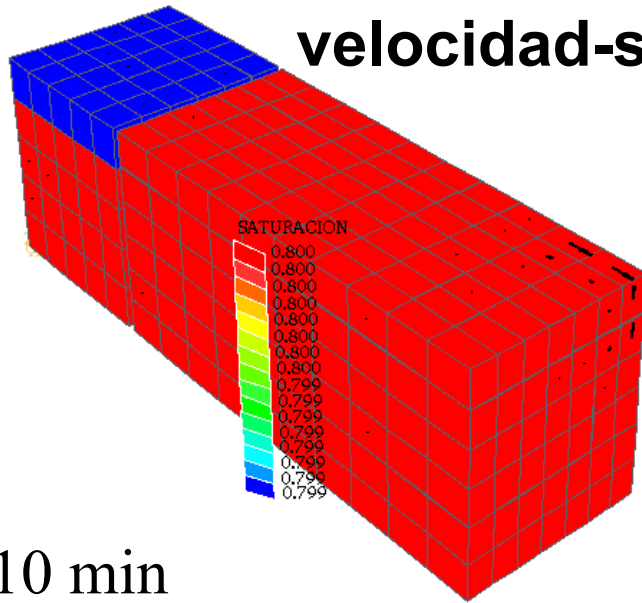


Flujo de saturación-saturación

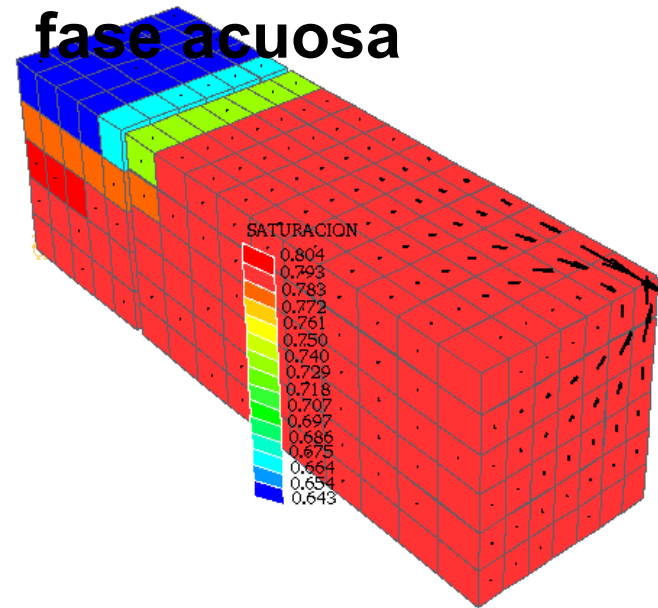


Evolución espacio-temporal para 2 subdominios

velocidad-saturación fase acuosa

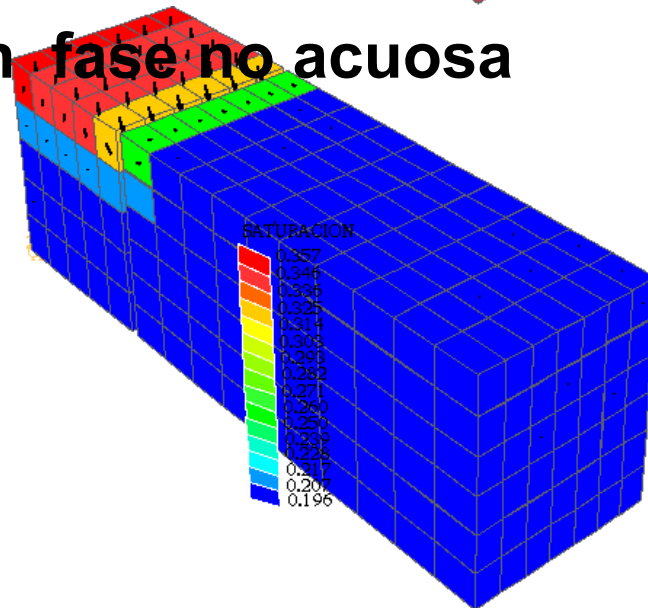
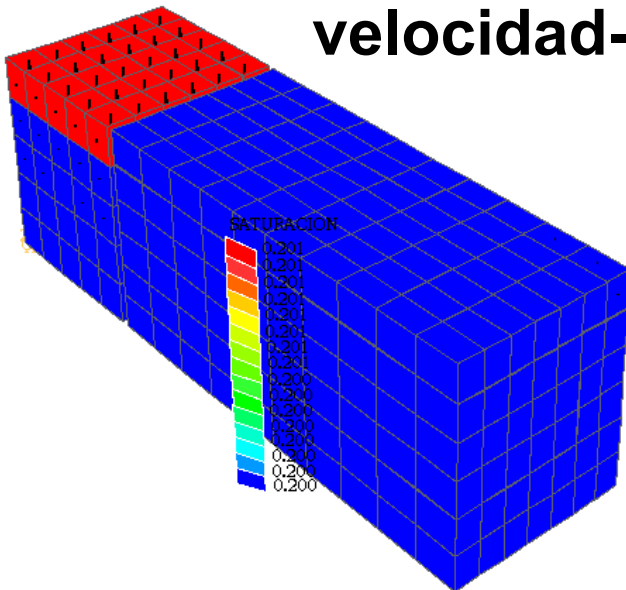


10 min



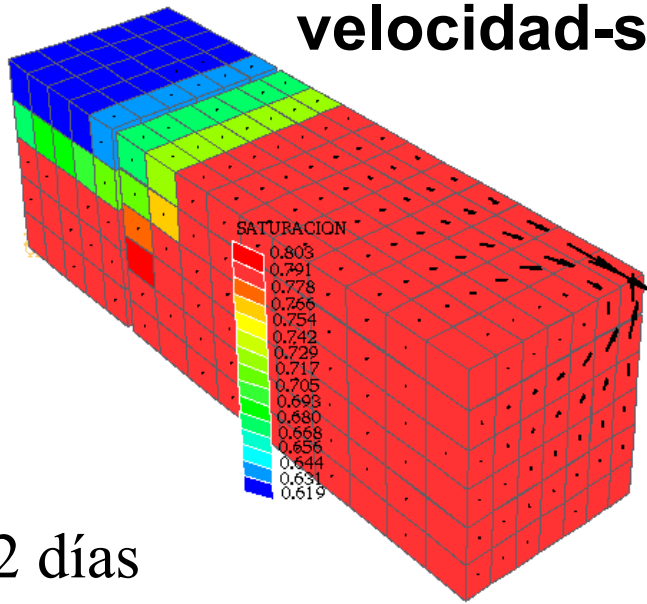
1 día

velocidad-saturación fase no acuosa

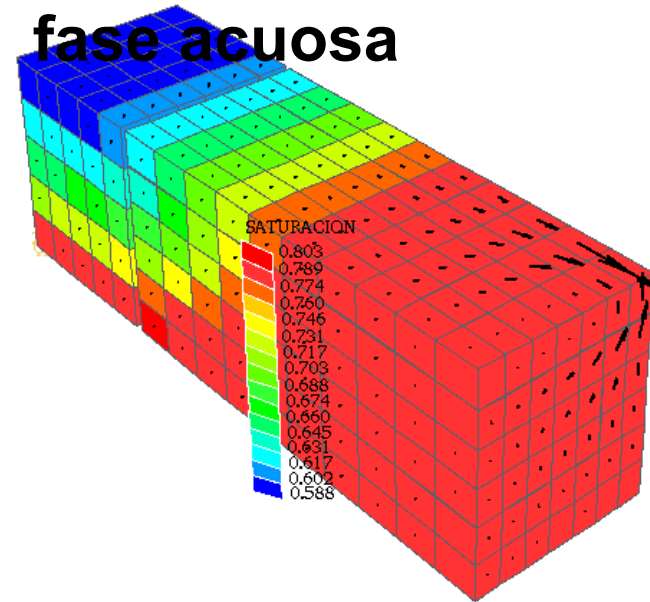


Evolución espacio-temporal para 2 subdominios

velocidad-saturación fase acuosa

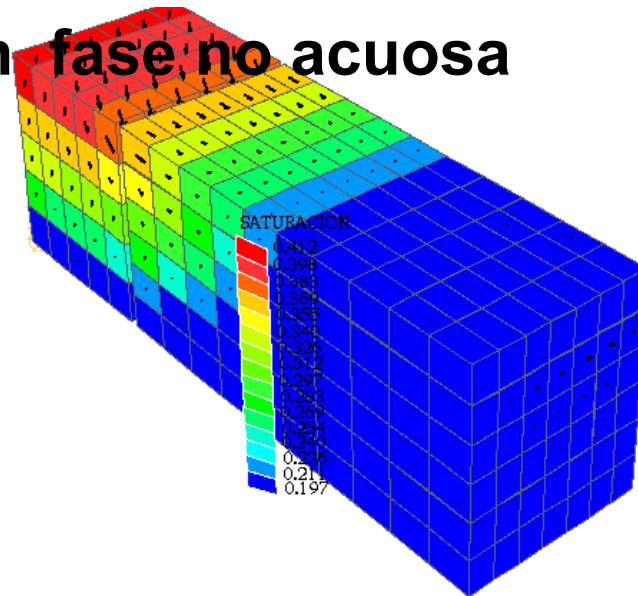
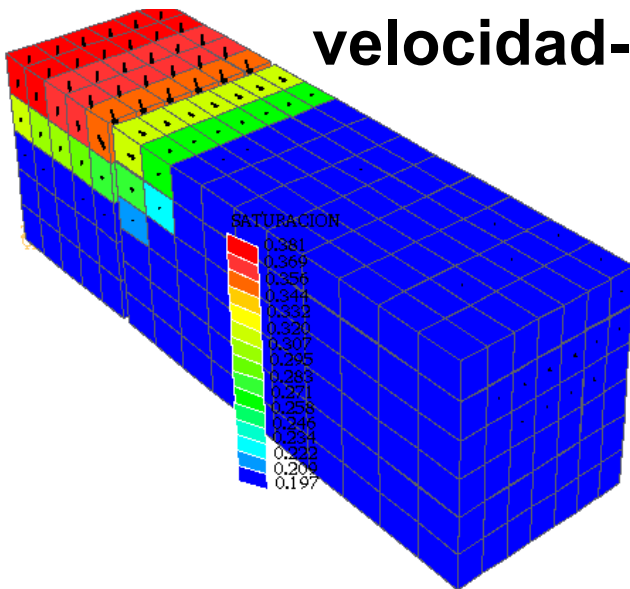


2 días



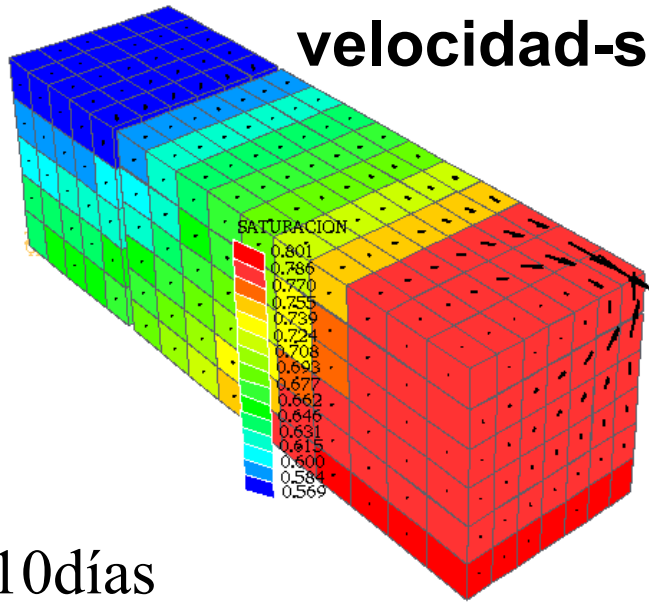
5 días

velocidad-saturación fase no acuosa

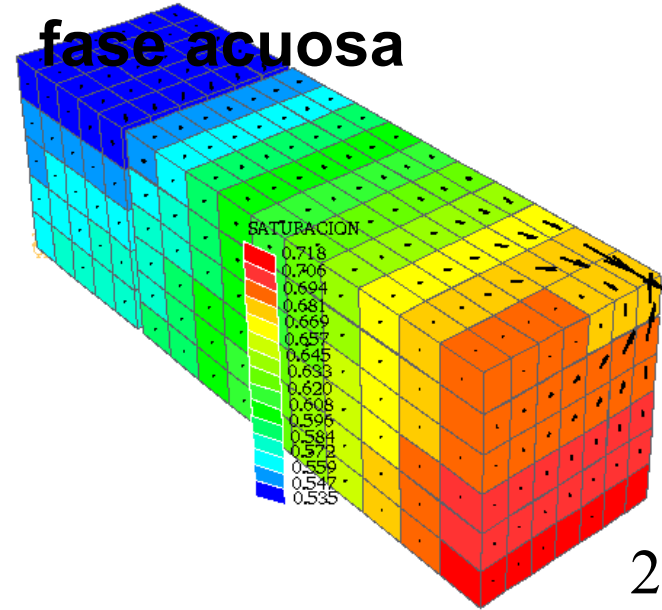


Evolución espacio-temporal para 2 subdominios

velocidad-saturación fase acuosa

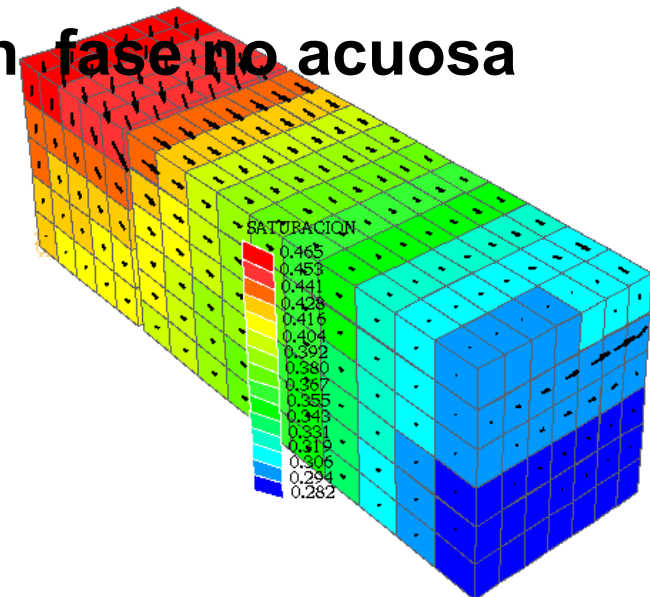
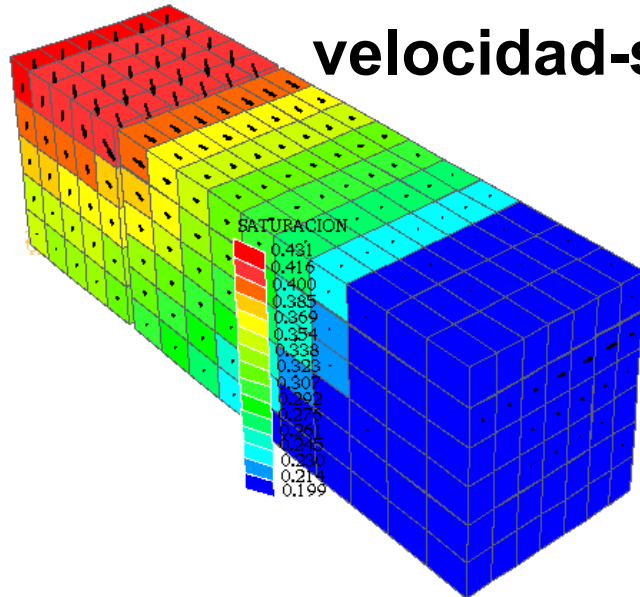


10días



20días

velocidad-saturación fase no acuosa



CONCLUSIONES

De acuerdo al planteamiento original de este trabajo, el objetivo central es desarrollar un modelo computacional tridimensional para el problema de flujo bifásico en medios porosos.

Para alcanzar este objetivo, se ha seguido una metodología que considera distintos aspectos del problema, y como resultado se ha obtenido un modelo computacional tridimensional, sustentado en los siguientes elementos.

1. Replanteamiento del problema original expresado en términos de los campos $(\mathbf{u}_\alpha, p_\alpha, s_\alpha)$ con $\alpha \in \{w, n\}$, por medio de dos modelos mixtos acoplados velocidad total-presión global (\mathbf{u}, p) y flujo de saturación-saturación (\mathbf{w}, s) .
2. Formulación variacional macrohíbrida mixta de los modelos, con restricciones de continuidad para los campos locales (\mathbf{u}_e, p_e) - (\mathbf{w}_e, s_e) y condiciones de frontera generales expresadas de manera subdiferencial.
3. Replanteamiento de los modelos variacionales en espacios de dimensión finita y aproximación de los campos solución por medio de espacios de elemento finito mixto. En la resolución numérica de los sistemas resultantes se aplicó un algoritmo de punto próximo tipo Uzawa.
4. Generación del modelo computacional en forma modular y experimentación numérica del mismo para obtener su rango operativo, el cual quedó establecido de manera experimental en $0.2 \leq s_e \leq 0.8$, considerando que el tensor de permeabilidad $D(s)\mathbf{K}(s)$ no es invertible cuando $D(s)\mathbf{K}(s) = \mathbf{0}$.
5. El modelo (\mathbf{w}, s) tipo advección-difusión se estabilizó por medio de un esquema de órbita regresiva para contemplar el caso advectivo-dominante, y como consecuencia, el paso de tiempo máximo que permite el modelo computacional se incrementó de $\Delta t = 60s$ sin estabilizar, a $\Delta t = 1hr$ una vez estabilizado.
6. El modelo desarrollado puede aplicarse a un número $n \geq 1$ de subdominios. Hasta el momento se han realizado simulaciones considerando desde un solo subdominio hasta siete subdominios con diferentes condiciones de frontera.
7. El módulo de discretización espacial del modelo permite mallar cada subdominio Ω_e y cada frontera interna Γ_e en forma independiente. Las mallas de frontera interna solo son coincidentes entre interfaces Γ_{ef} de subdominios vecinos, pero pueden ser diferentes, cuando se consideran distintos subdominios vecinos.

Por lo tanto, de acuerdo con los puntos anteriores, el modelo computacional tridimensional bifásico que se presenta en este trabajo, permite simular el flujo de dos fluidos inmiscibles incompresibles en un medio poroso heterogéneo y anisótropo, que en virtud de su planteamiento mixto, aproxima de manera independiente los campos velocidad \mathbf{u}_α , presión p_α y saturación s_α

de cada fase α , y como consecuencia de su estructura macrohíbrida, permite tratar un problema definido en un dominio Ω , como un conjunto de subproblemas definidos en $\{\Omega_1, \dots, \Omega_E\}$, una característica de gran utilidad cuando se consideran medios estratificados con discontinuidades en sus propiedades físicas, y también muy propia para tratar problemas de gran escala espacial.

REFERENCIAS

- [1] Morton E. Gurtin, *An Introduction to Continuum Mechanics*, Academic Press, New York, 1981.
- [2] G. Alduncin *Computational Variational Modeling of Multiphase Flow and Transport in the Subsurface*, in Lecture on Multiphase Flow and Transport Modeling in the Subsurface, Sheraton Hotel, Downtown, Mexico City, Mexico, September 10, 2003.
- [3] Arthur T. Corey *Mechanics of Immiscible Fluids in Porous Media*, Water Resources Publications, 1994.
- [4] Guy Chavent and Jérôme Jaffré *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation*, North-Holland, 1986.
- [5] Hong Wang, Dong Liang, Richard E. Ewing, Stephen L. Lions and Guan Qin, *An ELLAM-MFEM Solution Technique for Compressible Fluid Flows in Porous Media with Point Sources and Sinks*, Journal of Computational Physics 159, pp 344-376, 2000.
- [6] De Marsily G., *Quantitative Hydrogeology for Engineers*. Academic Pres, 1986.
- [7] Rainer Helmig, *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997.
- [8] Jim Douglas, Jr., Felipe Pereira and Li-Ming Yet, *A Locally Conservative Eulerian-Lagrangian Numerical Method and its Application to Nonlinear Transport in Porous Media*, Computational Geosciences, 4, pp 1-40, 2000.
- [9] G. Alduncin and N. Vera-Guzmán, *Parallel Proximal-Point Algorithms for Mixed Finite Element Models of Flow in the Subsurface*, Communications in Numerical Methods in Engineering , 20, pp 83-104, 2004.
- [10] G. Alduncin, *Formulación Subdiferencial y Variación de Problemas de Valores sobre la Frontera*, Comunicaciones Técnicas, Serie Investigación No. 4, Instituto de Geofísica, UNAM, 1986.
- [11] G. Alduncin, *Subdifferential and Variational Formulations of Boundary Value Problems*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 72, pp 173-186, 1989.
- [12] G. Alduncin, *Duality and Variational Principles of Potencial Boundary Value Problems*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 64, pp 469-485, 1987.
- [13] G. Alduncin, *Numerical Resolvent Methods for Macro-Hybrid Mixed Variational Inequalities*, Numer. Funct. Anal. and Optimiz., 1998; 19:667-696.
- [14] G. Alduncin, *Formulaciones Variacionales Duales y Lagrangianas de Problemas de Valores sobre la frontera*, Comunicaciones Técnicas, Serie Investigación No. 35, Instituto de Geofísica, UNAM, 1986.
- [15] G. Alduncin, 2005, *Macro-Hybrid Variational Formulations of Constrained Boundary Value Problems*, Numer. Funct. Anal. and Optimiz.

- [16] Gabay D., 1982, *Application de la méthode des multiplicateurs aux inéquations variationnelles*. In: *Méthodes de Lagrangien Augmenté* (fortin M, Glowinski R, eds). Dunod-Bordas, Paris, pp 279-307.
- [17] G. Alduncin, 1997, *On Gabay's Algorithms for Mixed Variational Inequalities*, Applied Mathematics & Optimization, 35, pp 21-44.
- [18] G. Alduncin, 2005, *Composition Duality Methods for Mixed Variational Inclusions*, Applied Mathematics & Optimization.
- [19] Lions P.L., Mercier B., 1979, *Splitting Algorithms for the Sum of Two Nonlinear Operators*, SIAM J. Numer. Anal. 16, pp 964-979
- [20] G. Alduncin., *Augmented Lagrangian Methods for the Quasistatic Viscoelastic two-body Contact Problem with Friction*. In Contact Mechanics. Curnier A (ed). PPUR: Lausanne, 1992; 337-360.
- [21] Brezzi F., Fortin M., *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Springer: New York, 1991.
- [22] Bertsekas DP. *Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods*. Academic Press: Boston, 1982.
- [23] Fortin M. Glowinski R (eds). *Méthodes de Lagrangien Augmenté: Applications à la Résolution Numérique de Problèmes aux Limites*. Dunod-Bordas: Paris, 1982.
- [24] Glowinski R., Le Tallec P., *Augmented Lagrangian and Operator-Splitting Methods in Nonlinear Mechanics*. SIAM: Philadelphia, 1989.
- [25] G. Chavent, *The global pressure, a new concept for the modelization of compressible two-phase flows in porous media*, Proceedings of Euromech 143/Delft / 2-4 September 1981.
- [26] J.E. Roberts, J.M. Thomas, Mixed and Hybrid Methods, in P.G. Ciarlet, J.L. Lions, eds., *Handbook of Numerical Analysis, Vol. II*, North-Holland, Amsterdam 1991, 523-639.
- [27] Douglas J.Jr., Ewing R., Wheeler M. *The approximation of the pressure by a mixed method in the simulation of miscible displacement*. *M²AN* 1983; 17: 17-33.
- [28] Chavent G., Cohen G., Jaffre J., *Discontinuous upwinding and mixed finite elements for two phase flow in reservoir simulation*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 1984; 47:93-118.
- [29] Ewing R., Heinemann R., *Mixed finite approximation of phase velocities in computational reservoir simulation*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 1984; 47:161-176.
- [30] LeTallec P., *Domain decomposition methods in computational mechanics*. Computational Mechanics Advances 1994; 1:121-220.
- [31] Z. Chen and R.E. Ewing, *Degenerate two-phase incompressible flow IV: local refinement and domain decomposition*, J. Scientific Comp., 18 (2003), 329-360.

- [32] B.Daya Reddy, *Introductory Functional Analysis, with Applications to Boundary Value Problems and Finite Elements*, 1998, Springer-Verlag New York, Inc.
- [33] Lions J.L., Magenes E., *Non-Homogeneous Boundary Value Problems and Applications*, Springer-Verlag, New York, 1972.
- [34] Duvaut G., Lions J.L., *Les Inéquations en Mécanique et en Physique*, Dunod, Paris, 1972.
- [35] Showalter R.E., *Hilbert Space Methods for Partial Differential Equations*, Pitman, Londres, 1977.
- [36] R.Glowinski, J.L.Lions and R.Trémolières, *Numerical Analysis of Variational Inequalities*, North-Holland, Amsterdam, 1981.
- [37] R.Glowinski, *Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems*, Springer, New York, 1984.
- [38] Ekeland I., Temam R., *Analyse Convexe et Problemes Variationnels*, Dunod, Gauthier-Villars, Paris, 1974.
- [39] G. Alduncin , *Composition Duality Principles for Mixed Variational Inequalities*, Mathematical and Computer Modelling, 41(2005), pp 639-654.
- [40] F. Brezzi, W.W.Hager and P.A.Raviart, *Error estimates for the finite-element solution of variational inequalities*, Part II. Mixed methods, Numer. Math. 31, 1978, pp 1-16.
- [41] A. Quarteroni and A. Valli, *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*, Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [42] J.J. Moreau, *Proximité et dualité dans une espace hilbertienne*, Bull. Soc. Math. France 1965, 93, pp 273-299.
- [43] Zhangxin Chen and Richard E. Ewing, *Fully discrete finite element analysis of multiphase flow in groundwater hydrology*, SIAM J.Numer. Anal., 1997, V.34, No.6, pp 2228-2253.
- [44] Zhangxin Chen and Richard E. Ewing, *Mathematical analysis for reservoir models*, SIAM J.Math.Anal., 1999, V.30, No.2, pp 431-453.
- [45] C.J. Van Duijn, A. Mikelic and I.S. Pop, *Effective equation for two-phase flow with trapping on the micro scale*, SIAM J.Appl.Math., 2002, V.62, No.5, pp 1531-1568.
- [46] O. Pironneau, *Méthodes des Éléments Finis pour les Fluides*, Collection Recherches en Mathématiques Appliquées, sous la direction de P.G. Ciarlet et J.L. Lions, 1988, edit. Masson, Paris.
- [47] Gonzalo Alduncin, Jorge Esquivel-Avila and Norberto Vera-Guzmán, 2005, *Steady filtration problems with seawater intrusion: Macro-hybrid finite element approximations*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, V.49, pp 935-957.