



Universidad Nacional Autónoma de México
Instituto de Geofísica
Posgrado en Ciencias de la Tierra

Diseño de la solución numérica de un modelo
de flujo fraccional de sistemas bifásicos

Tesis
Que para obtener el grado de
Doctor en Ciencias

Presenta
Juan Diego Martínez Nájera

Tutor: Dra. Birgit Steinich

México, D.F. 2006



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 Lupita, Inés e Isabel

Mi esposa y pequeñas gemelitas, quienes dan color a mi vida

Al recuerdo de Catita y Esteban

Mis padres, a quienes agradezco lo que soy

A mis hermanos

Por su apoyo, comprensión y paciencia

Agradecimientos

A mis maestros

Que me enseñaron el maravilloso drama de la Ciencia
Que me enseñaron el drama de la aparente separación entre Fe y Razón
Que me enseñaron su fin en la universalidad de la Deidad

A mis revisores

Dra. Birgit Steinich
Dr. Carlos Cruickshank Villanueva
Dr. Jaime Garfias Solís
Dr. Roberto Mercado Escalante
Dra. Leticia Flores Márquez
Dr. Herminio Blancarte Suárez
Dr. Oscar Escolero Fuentes

Por su ayuda para mejorar y concluir este trabajo

Contenido

Introducción	iii
Resumen	vi
Summary	vii

Capítulo I.

Historia del estudio del flujo y transporte miscible, inmisible y composicional

1. Introducción	1
2. Objetivo y estrategia de aproximación	2
3. Marco histórico	3

Capítulo II.

Fenomenología de flujo y transporte inmisible. Ecuaciones constitutivas y de conservación

4. Introducción	9
5. Ley de Darcy y permeabilidad relativa	12
6. Ecuaciones de balance de flujo y transporte miscible e inmisible	17
6.1 Flujo de una sola fase y transporte miscible	17
6.2 Conceptos de flujo fraccional para describir el flujo bifásico	20
6.2.1 Formulación tipo presión-presión	21
6.2.2 Formulación tipo presión-saturación	22
6.2.3 Formulación con velocidad total no ponderada	23
7. Estrategia de aproximación	25

Capítulo III.

Subdiferenciales y resolventes. Problemas en velocidad, presión y de transporte

8. Introducción	27
9. Conceptos de análisis convexo	29
10. Formulación subdiferencial local y global de problemas de valores a la frontera	32
11. El concepto de resolventes y el problema mixto	35

12. El problema de flujo en velocidad y presión	39
12.1 Aproximación de elemento finito en multidominio	42
12.2 Algoritmos de punto próximo	44
13. El problema de transporte advectivo dominante	45
13.1 Aproximación del término advectivo	53
13.2 Algoritmos iterativos tipo Uzawa	54
14. Resumen de la estrategia, acoplamiento e hipótesis de trabajo	58

Capítulo IV.

Resultados numéricos en el problema de transporte

15. Introducción	59
16. Problema de transporte advectivo dominante	59
16.1 Código de la implementación numérica del problema de transporte	64
16.2 Casos analizados y resultados numéricos	87
16.3 Significado de los resultados	89
17. Conclusión	91
18. Limitantes	92
19. Dirección de trabajos futuros	93
20. Apéndices	95
20.1 Del Capítulo II	95
20.2 Del Capítulo III	98
21. Referencias	106

Introducción

La modelación matemática y simulación numérica del flujo y transporte inmiscible resulta de fundamental importancia para comprender la mayoría de los fenómenos relacionados con la contaminación en acuíferos. En la actualidad las fuentes de abastecimiento de agua subterránea padecen deterioro en calidad y cantidad. Cada vez es más indispensable incluir en los estudios de campo, de caracterización de regiones hidrológicas para el abastecimiento, investigaciones de modelación matemática que permitan tomar decisiones optimizadas para el manejo del agua o rehabilitación de mantos acuíferos contaminados.

En este trabajo se presenta una solución numérica de un modelo de flujo fraccional de sistemas bifásicos en aguas subterráneas. En los fenómenos de dos o más fases los fluidos participantes mantienen rasgos físicos y químicos diferenciadores, aparecen en la vecindad de vertidos, derrames o lixiviados de aguas residuales, hidrocarburos (diesel, gasolina, combustóleo, etc.), plumas térmicas, intrusión salina, yacimientos petroleros, zonas parcialmente saturadas, etc.

El contexto físico del trabajo para el flujo bifásico, tiene sus antecedentes en el concepto de flujo fraccional; mediante el que se derivan sistemas acoplados para el flujo (en velocidad y presión) monofásico y para el transporte miscible en acuíferos. La solución numérica que se propone para el esquema de flujo fraccional resultante, se fundamenta en análisis convexo, formulaciones variacionales de valores inicial y a la frontera, subdiferenciales, resolventes, elemento y diferencias finitas y elemento finito mixto macrohíbrido.

La implementación numérica del problema en velocidad y presión se realiza mediante elemento finito mixto macrohíbrido, con el que se resuelve para los campos de velocidad y presión de manera simultánea (Alduncin y Vera, 2003).

El motivo principal de este trabajo consiste en proponer un procedimiento de solución para el problema de transporte miscible. El modelo físico adoptado para el análisis del transporte miscible, naturalmente se basa en el balance de masa que toma en cuenta las componentes de advección y difusión, así como los términos de absorción cinética de primer orden y de fuente/sumidero para

la concentración; por su parte, el balance de momentum es considerado explícitamente con la relación de Darcy (Martínez Nájera, 2002). El procedimiento desarrollado conforma un modelo de control o de manejo, ya que aparte de la solución numérica predictiva de la ecuación de transporte, simultáneamente se busca que la solución satisfaga límites establecidos por normas de calidad del agua; el esquema completo se compone por un algoritmo primal, que determina la solución para la concentración y un mixto de control interno dualizado, que estima las magnitudes del campo dual o mecanismo de control. Los algoritmos se implementan numéricamente mediante aproximaciones internas de elemento finito de tipo semidiscreto y un esquema teta en el tiempo, con tratamiento upwind parcial para el término advectivo. Las aproximaciones totalmente discretas satisfacen el principio de máximo y de conservación de masa discretos, con lo que se garantizan las propiedades de estabilidad y convergencia de los algoritmos propuestos. Se especifica la aplicación de la teoría mediante un ejemplo hipotético, con el que se analizan los dos casos posibles para la concentración de un soluto en un campo de flujo: cuando rebasa y cuando no excede los límites de calidad del agua. Se demuestra numéricamente que los algoritmos primal y mixto son robustos ante situaciones advectivo dominantes. En las situaciones analizadas los algoritmos determinan las soluciones numéricas apropiadas. Los algoritmos son implementados en Fortran 77.

El trabajo se compone de cuatro capítulos, los cuales se resumen de la siguiente forma.

El **Capítulo I** plantea el objetivo del proyecto, así como aspectos históricos del estudio del flujo y transporte miscible, inmiscible y composicional.

El **Capítulo II** presenta la física del fenómeno del flujo y transporte inmiscible. Se analizan conceptos básicos, tales como la Ley de Darcy y permeabilidad relativa. También se describen las ecuaciones de conservación del flujo y transporte miscible e inmiscible, el concepto de flujo fraccional, así como la estrategia de aproximación adoptada en el trabajo.

Por su parte, el **Capítulo III** conforma el núcleo analítico del proyecto de estudio, en él se establecen los aspectos matemáticos y numéricos de aproximación, desarrollados en este trabajo, para resolver el problema de

transporte, derivado del concepto de flujo fraccional para el flujo bifásico. Se presentan conceptos de análisis convexo, formulaciones variacionales de problemas de valores inicial y a la frontera, subdiferenciales, resolventes y algoritmos de tipo Uzawa, necesarios para establecer la estrategia de solución numérica del problema de transporte.

Finalmente, en el **Capítulo IV** se presentan los resultados numéricos obtenidos, después de aplicar la teoría desarrollada a ejemplos sintéticos. Con los ejemplos, se demuestra el adecuado comportamiento numérico de la metodología propuesta para la solución de problemas de transporte miscible advectivo dominantes.

Resumen

El objetivo del trabajo es presentar una solución numérica de una descomposición de modelos de flujo bifásico, desde la perspectiva de flujo fraccional, mediante el análisis de los problemas correspondientes en velocidad y presión y de transporte de solutos en una sola fase en sistemas acuíferos.

El trabajo se relaciona con un tipo de planteamiento de las ecuaciones de balance para el flujo y transporte bifásico denominado flujo fraccional, el cual consiste en que, mediante el uso de las ecuaciones de conservación de masa y energía del flujo multifásico se definen los conceptos de presión global, relación de movilidad, flujo fraccional y velocidad total ponderada, a partir de las cuales se derivan sistemas de ecuaciones acopladas para el flujo monofásico y transporte miscible en acuíferos. Desde la perspectiva de flujo fraccional se concluye que es posible descomponer el estudio del flujo bifásico mediante el análisis de los problemas en velocidad y presión y de transporte de solutos en sistemas acuíferos. Por lo tanto la solución numérica que se propone en este trabajo, para el flujo bifásico, se compone por las soluciones numéricas de los problemas: i) en velocidad y presión monofásico, desarrollada por Alduncin y Vera (2003); así como ii) de transporte de solutos desarrollada por el autor, Martínez Nájera (2002), que conforma el motivo fundamental de este trabajo. La estructura matemática sobre la que se fundamentan los algoritmos de solución son los principios de conservación de masa y energía, el análisis variacional de problemas de valores inicial y a la frontera, subdiferenciales, análisis convexo y resolventes; mientras que la implementación numérica de los algoritmos emplea técnicas de elemento finito (mixto macrohíbrido) y diferencias finitas.

Summary

The objective of the work is to present a numerical solution of a decomposition of models of two-phase flow, from the perspective of fractional flow, by means of the analysis of the corresponding problems in velocity and pressure and of transport of solutes in a single phase in aquifers systems.

The work is related to a type of balance equations for the two-phase flow and transport denominated fractional flow, which, by means of the use of the equations of conservation of mass and energy of the multiphase flow the concepts of global pressure, relation of mobility, fractional flow and weighted total velocity are defined, from which are derived a coupled system of equations for the single-phase flow and miscible transport in aquifers. From the perspective of fractional flow one concludes that it is possible to decompose the study of the two-phase flow by means of the analysis of the problems in velocity and pressure and of transport of solutes in aquifers systems. Therefore the numerical solution that sets out in this work, for the two-phase flow, composes by the numerical solutions of the problems: i) in velocity and pressure of single-phase flow, developed by Alduncin and Vera (2003); as well as ii) of transport of solutes developed by the author, Martínez Nájera (2002), who conforms the fundamental reason for this work. The solution algorithms are based on the mathematical structure of the principles of conservation of mass and energy, the variational analysis of initial and boundary value problems, subdifferentials, convex analysis and resolvents; whereas the numerical implementation of the algorithms uses techniques of finite element (mixed macrohybrid) and finite differences.

Capítulo I

Historia del estudio del flujo y transporte miscible, inmisible y composicional

1 Introducción

Es probable que la historia del análisis de la disponibilidad y cuidados del agua subterránea sea tan antigua como la civilización. En las regiones donde el agua podía encontrarse de manera directa, no quedaba más que el manejo y preservación del recurso; sin embargo, cuando su ocurrencia no se daba de manera natural el acceso fue más elaborado, para lo que se tuvieron que construir estructuras de conducción tales como acueductos y canalizaciones; así como pozos, galerías filtrantes, depósitos y estanques para el almacenamiento. Parece que una condición necesaria, para el florecimiento de las antiguas y actuales culturas, lo conforma la posibilidad de obtener el agua para el consumo humano. Quizás los primeros registros sobre el cuidado y manejo del agua potable se encuentran en textos y códices de antiguas civilizaciones del Mediterráneo y el Ganges tales como: la Egipcia, Babilónica, Sumeria, Hitita, Griega, Romana, Persa e Hindú; y de las estepas, islas y bosques, tales como: la Celta, Germana, Eslava, China y Japonesa; de igual manera en las establecidas en América, África y Círculos Polares (Riva Palacio, 1981 y Grimal, 1966). Sin embargo, no es sino hasta el siglo XVI, luego del renacimiento, en donde se cuenta con los primeros documentos relacionados con el estudio metódico y analítico del flujo y transporte del agua subterránea, con los trabajos de Newton, Navier, Stokes, Poiseuille, Saint Venant, Darcy, Dupuit, etc. El desarrollo histórico del análisis del flujo miscible e inmisible se relaciona estrechamente con el estudio de la mecánica del flujo y transporte en sistemas acuíferos.

La historia del cuidado y manejo del agua potable, iniciada por las antiguas civilizaciones, continúa hasta nuestros días. En la actualidad los trabajos y estudios encaminados a analizar los aspectos físicos y matemáticos del fenómeno del flujo y transporte miscible, inmisible y composicional en medios subterráneos

porosos, fracturados o combinación de ambos, tienen como finalidad evaluar y predecir el comportamiento de dichos fenómenos ante diferentes situaciones de esfuerzos hidrológicos y condiciones de frontera. El método consiste primeramente en analizar la física de los eventos involucrados para establecer las ecuaciones de balance de masa, momentum y energía que gobiernan el comportamiento del fenómeno que se estudia; para después proponer procedimientos analíticos y numéricos de solución, luego de la determinación en campo de la geometría y los parámetros, condiciones iniciales y de contorno que intervienen en la descripción del flujo y transporte de sustancias miscibles o inmiscibles. Las ecuaciones de balance sintetizan y acoplan las relaciones de las diferentes variables dependientes que describen los aspectos físicos, químicos y bioquímicos existentes en el sistema en consideración (Martínez Nájera, 2002 y Martínez Nájera et al., 2005). Los procedimientos numéricos han aumentado su importancia debido a que cada vez es posible abordar problemas más complejos, tal y como ocurre en el caso del análisis del flujo y transporte multifásico y composicional. Las técnicas numéricas de solución y las caracterizaciones de campo de los sistemas hidrológicos, se relacionan estrechamente. La evaluación y predicción del destino de sustancias miscibles o inmiscibles en sistemas subterráneos permite tomar decisiones relacionadas con el uso, preservación o mejoramiento de la calidad y cantidad del agua (Kobus y Kinzelbach, 1989; Martínez Nájera 2002; Dracos y Stauffer, 1994 y Kobus, 1992).

En este capítulo se presenta un contexto histórico general de los principales trabajos en hidrogeología de alguna manera relacionados con el flujo y transporte multifásico; en especial con los relacionados de manera directa con la estructura conceptual de flujo fraccional, sobre la que se fundamentan el objetivo y estrategia de aproximación de este trabajo de investigación. Se establecen los antecedentes que habrán de ser desarrollados de manera exhaustiva en los capítulos II y III.

2 Objetivo y estrategia de aproximación

Presentar una solución numérica de una descomposición de modelos de flujo bifásico, desde la perspectiva de flujo fraccional, mediante el análisis de los correspondientes problemas en velocidad y presión y de transporte de solutos de una sola fase en sistemas acuíferos.

El trabajo que se presenta se relaciona con un tipo de planteamiento de las ecuaciones de balance para el flujo y transporte bifásico denominado *flujo fraccional*, el cual consiste en que, mediante el uso de las ecuaciones de conservación de masa y energía del flujo multifásico se definen los conceptos de presión global, relación de movilidad, flujo fraccional y velocidad total ponderada, a partir de las cuales se derivan sistemas de ecuaciones acopladas para el flujo monofásico y transporte miscible en acuíferos (Chen y Ewin, 1997; Chavent y Jaffré, 1986; Chen et al., 1994; Chen et al., 1995; Chen, 1996; Antoncev, 1972; Ewing y Celia, 1990; Ewing, 1996 y Chen et al., 2000).

Desde la perspectiva de flujo fraccional se concluye que es posible descomponer el estudio del flujo bifásico mediante el análisis de los problemas en velocidad y presión y de transporte de solutos en sistemas

acuíferos. Por lo tanto la solución numérica que se propone en este trabajo para el flujo bifásico, se compone por las soluciones numéricas de los problemas: i) en velocidad y presión monofásico, desarrollada por Alduncin y Vera (2003); así como ii) de transporte de solutos desarrollada por el autor, Martínez Nájera (2002), lo que conforma el motivo de este proyecto. La estructura matemática sobre la que se fundamentan los algoritmos de solución son los principios de conservación de masa y energía, el análisis variacional, subdiferenciales, análisis convexo y resolventes; mientras que la implementación numérica de los algoritmos emplea técnicas de elemento finito (mixto macrohíbrido) y diferencias finitas.

3 Marco histórico

Los sistemas subterráneos son un subconjunto del ciclo hidrológico; son sistemas termodinámicamente abiertos, en el sentido de que pueden intercambiar masa y energía con su entorno mediante calor y/o trabajo (Helmig, 1997). Por medio de sus fronteras los sistemas subterráneos se acoplan con la atmósfera y cuerpos de agua de superficie, incluyendo los ríos, lagos y el mar. El proceso de intercambio de masa y energía se da mediante infiltración de recarga artificial en pozos, embalses, tanques de almacenamiento, etc.; o de manera natural, como la lluvia, ríos, lagos, interfaces salinas, etc. En los procesos de transferencia el subsuelo intercambia: nutrientes, contaminantes (miscibles o inmiscibles) orgánicos o inorgánicos, recargas naturales, etc. El flujo y transporte de sustancias en acuíferos involucra la participación de un amplio rango de escalas. Los sistemas subterráneos son de tipo multifásico. Cuando ocurre contaminación, los procedimientos de rehabilitación de acuíferos, cuando es posible, son complejos (Pankow y Cherry, 1996 y Kobus et al., 1996). La mayoría de los modelos de flujo y transporte describen el movimiento e interacción de uno o más componentes disueltos en el agua. Sin embargo, muchas sustancias son hidrofóbicas al ser insolubles o ligeramente solubles; por lo que se manifiestan como fases separadas dinámicamente acopladas entre sí y con el sistema suelo-agua residentes. Las ecuaciones de balance para sistemas multifásicos son más complejas que para los casos monofásicos, más aún, si también se tienen que considerar intercambios de calor (Pankow y Cherry, 1996; Bear y Verruijt, 1987 y Helmig, 1997). Este trabajo se relaciona con el estudio del flujo y transporte no miscible.

En la historia del estudio del flujo no miscible y composicional se han desarrollado numerosas investigaciones relacionadas con el tema, tales como: el análisis de aspectos físicos y parámetros en medios porosos no saturados y multifásicos, flujo y transporte en zonas capilares, estudios de laboratorio para determinar la permeabilidad relativa en dos y tres fases (agua-petróleo, líquido-gas, gas-petróleo-agua, etc.), estudios de laboratorio para determinar la conductividad en la zonas capilares, estudio del fenómeno de histéresis en medios porosos, transporte composicional, física y análisis de intrusión salina en acuíferos costeros y problemas de superficie libre; más recientemente, el análisis del flujo y transporte composicional, derivado de los problemas de contaminación por depósitos y/o derrames accidentales o deliberados de diferentes sustancias hidrofóbicas en el subsuelo; estudio del flujo y transporte de mezclas (gas-agua, gas-petróleo-agua, etc.) en

medios porosos y/o fracturados, procedimientos numéricos de solución del flujo en materiales no saturados, planteamiento y solución de problemas en yacimientos petroleros, elemento y diferencias finitas aplicados a problemas en dos y tres fases, análisis de las ecuaciones de balance y planteamiento de los correspondientes problemas de valores inicial y a la frontera del flujo y transporte multifásico, etc. En general los trabajos se pueden clasificar de dos formas, la primera: investigaciones relacionadas con la física del flujo y transporte miscible, inmiscible y composicional; la segunda: aspectos relacionados con procedimientos para la solución numérica de los correspondientes esquemas físicos, caso al que pertenece la naturaleza del proyecto que se presenta.

Desde la perspectiva de la formulación física del fenómeno de flujo y transporte multifásico en acuíferos, el objetivo de este proyecto de investigación tiene sus antecedentes directos en el concepto de flujo fraccional. En lo relacionado con la solución numérica del esquema resultante, los fundamentos se encuentran en la formulación variacional de problemas de valores inicial y a la frontera, subdiferenciales, resolventes, algoritmos de Uzawa y elemento finito mixto macrohíbrido. En los siguientes dos capítulos se discuten los aspectos relevantes de los esquemas mencionados en lo relativo a la física del flujo multifásico; así como también, en los aspectos matemáticos y numéricos de solución que se proponen en este trabajo de investigación.

El análisis del flujo multifásico, desde el contexto del flujo fraccional consiste en que, mediante el uso de las ecuaciones de balance de masa del flujo multifásico se definen los conceptos de presión global, relación de movilidad, flujo fraccional y velocidad total ponderada, a partir de las cuales se derivan sistemas de ecuaciones acopladas para el flujo monofásico y transporte miscible en acuíferos, Chen y Ewin (1997), Chen et al. (1994), Antoncev (1972) y Chavent y Jaffré (1986).

Ewing (1996) indica que la formulación de flujo fraccional permite elegir procedimientos eficientes de solución numérica, que aprovechan las características inherentes de las ecuaciones de flujo y transporte. El mismo autor analiza la situación del flujo en tres fases bajo condiciones de conservación de masa, acoplamiento débil en el tiempo del sistema resultante y problemas de escalas con heterogeneidades en hidrología subterránea e ingeniería petrolera; al igual que Chavent y Jaffré (1986) y Ewing y Celia (1990) realiza simulaciones para yacimientos petroleros de sistemas en tres fases y desde el esquema de flujo fraccional, lo que conduce a un sistema de dos ecuaciones en saturación y un sistema de primer orden en velocidad global y presión total ponderada. Con respecto a la solución numérica del sistema resultante, Ewing (1996) comenta que: debido a que los términos de transporte, de las dos ecuaciones de saturación, dependen fuertemente de la velocidad total, se determina que las soluciones numéricas serán efectivas si resuelven con suficiente precisión a la velocidad; más aún y debido a las heterogeneidades en medios subterráneos, que originan discontinuidades en conductividad y almacenamiento, también establece que los procedimientos de elemento finito mixto resultan idóneos para resolver por separado, y con la precisión necesaria, la velocidad y presión; permitiendo también, de manera heurística forzar la continuidad de los parámetros. En la aproximación de geometrías complejas sugiere el empleo de tetraedros deformados 3D; Ewing (1996) indica que las situaciones de geometrías complejas, deformaciones de elementos y reescalamientos pueden implicar tensores de conductividad llenos;

por lo que también resultan adecuadas las técnicas de elemento finito mixto híbrido (Chen et al., 1995) que permiten estimaciones locales de velocidad y presión, penalizando las discontinuidades por las fronteras de los subdominios.

De manera equivalente y para la situación del flujo en dos fases, se emplea, en el problema de flujo en velocidad y presión, una formulación de tipo elemento finito mixto macrohíbrido (Brezzi y Fortin, 1991 y Roberts y Thomas, 1991); así como también las técnicas de resolventes y penalizaciones exactas, para dar solución a los sistemas resultantes (Alduncin, 1996 y 1997; Alduncin y Vera 2003). Binning y Celia (1996) efectúan un análisis de flujo fraccional, determinan que la formulación exhibe atributos atractivos para los fines de la modelación matemática y simulación numérica del problema del flujo multifásico. Analizan una formulación de tipo presión y saturación, similar a la desarrollada por Alduncin y Vera (2003); establecen que la perspectiva es ventajosa para una variedad de problemas, pero que es necesario una cuidadosa elección de los procedimientos numéricos empleados. Al igual que en este proyecto, en su trabajo consideran aspectos relacionados con la implementación práctica de la aproximación de flujo fraccional; estudian condiciones generales de frontera, implicaciones de la heterogeneidad de los materiales, especulan las dificultades potenciales ante situaciones de frentes múltiples de infiltración y drenaje, así como también consideran aspectos generales relacionados con los términos de compresibilidad y gravedad. Binning y Celia (1996) indican que la formulación de tipo presión-saturación conduce a expresiones similares a la de transporte advectivo difusivo y de flujo monofásico en sistemas acuíferos. Su trabajo se centra únicamente en el problema asociado de transporte y proponen procedimientos basados en algoritmos Lagrangianos, que permiten soluciones adecuadas en pasos de tiempo grandes, y en las direcciones características; también presentan una solución para la relación de saturación, basada en el procedimiento de direcciones características.

Chen (1996) establece que desde el esquema de flujo fraccional se ha demostrado que pueden ser resueltas las ecuaciones de flujo en dos fases para yacimientos petroleros (Antoncev, 1972 y Chavent y Jaffré, 1986); así como en hidrología subterránea (Chen et al., 1994 y 1995), y que las aproximaciones son más eficientes que las originales en dos presiones. Indica que la principal ventaja del esquema es que, el flujo fraccional conduce a sistemas formalmente similares al de flujo de una sola fase y de transporte miscible en acuíferos, por lo que es posible elegir o construir nuevos procedimientos numéricamente más eficientes; más aún, menciona que en el contexto fraccional ya han sido incorporadas las condiciones de frontera comúnmente encontradas en ingeniería petrolera e hidrogeología (Chen et al., 1994). Chen (1996) discute diferentes planteamientos para el flujo en tres fases. Primeramente deriva la formulación en fase que involucra a la presión de fase, velocidad total y dos saturaciones; luego un esquema pseudo-global que contiene una presión pseudo-global, una velocidad total y dos saturaciones; finalmente presenta una formulación global que implica una presión global, una velocidad total y dos saturaciones, bajo la condición diferencial total sobre la forma de las funciones de permeabilidad relativa y presión capilar del flujo en tres fases. Chen (1996) argumenta que para el caso de dos fases, las ecuaciones de balance pueden escribirse en términos de una presión global y una saturación, bajo hipótesis físicamente razonables; pero en el caso de tres fases la

condición diferencial total no tiene significado físico, pero es una condición necesaria y suficiente para que las ecuaciones de balance sean descritas en términos de una presión global y dos saturaciones. Al comparar las diferentes alternativas, Chen (1996) demuestra que el acoplamiento entre las ecuaciones de presión y saturación en la formulación de fase es más fuerte que para el caso de la formulación global, por lo que las ecuaciones en fase son más difíciles de resolver. También demuestra que la formulación pseudo-global se reduce a la global bajo condiciones sobre las funciones de permeabilidad relativa y presión capilar de flujos en tres fases. Determina que el acoplamiento entre la presión y la saturación en la forma pseudo-global sigue el mismo patrón que para el caso de una fase; finalmente discute la manera en que sus técnicas pueden ser extendidas al flujo multifásico con intercambio de masa entre las fases en el medio poroso. Con respecto a la solución numérica de los esquemas presentados, menciona que pueden ser empleados procedimientos de elemento finito mixto para resolver el flujo monofásico en velocidad y presión, pero no indica nada acerca del problema de transporte. En el siguiente capítulo se discuten aspectos fundamentales de los anteriores planteamientos.

Chen et al. (2000) estudian un modelo composicional multicomponente en tres fases, con usos potenciales en acuíferos y yacimientos petroleros. Su propuesta incorpora compresibilidad, efectos composicionales, intercambio de masa entre las fases, así como también efectos capilares. Su modelo consiste de la Ley de Darcy, conservación de masa para las componentes de hidrocarburos, equilibrio termodinámico para el intercambio de masa entre las fases y las ecuaciones de estado para las saturaciones. Determinan diferentes formulaciones para la relación de presión, probando que dicha relación conforma un problema estándar de tipo parabólico; mientras que para las ecuaciones modificadas de conservación de componentes, demuestran que son de tipo hiperbólico parabólico, de advección difusión, con la presencia de fuerzas difusivas capilares; para efectos de simplicidad, desprecian las componentes de la dispersión hidráulica y difusión molecular. Discuten la linealidad y acoplamiento del sistema de ecuaciones diferenciales que gobiernan el fenómeno; demuestran que la ecuación de presión es débilmente no lineal, las de conservación de componentes son fuertemente no lineales y tienen una dependencia fuerte de la presión, además de estar fuertemente acopladas con las restricciones de equilibrio termodinámico. El esquema numérico que proponen consiste de elemento mixto para resolver la ecuación de la presión y el método de adjunto localizado Euleriano-Lagrangiano para las ecuaciones de conservación de componentes; procedimientos similares son considerados en Qin (1995) y Qin et al. (1996). Elemento y diferencias finitas por sí solos no dan soluciones con la exactitud suficiente para el término de velocidad en la relación de la presión; mientras que elemento finito mixto sí satisface el requisito anterior, además de que los elementos de partición permiten la aproximación de geometrías complejas. Por su parte, los procedimientos de adjunto localizado de tipo Euleriano-Lagrangiano permiten resolver problemas advectivo dominantes (Celia et al., 1990) para la componente de transporte de una sola fase. Para manejar el acoplamiento fuerte del sistema de ecuaciones de presión y de conservación de componentes, Chen et al. (2000) emplean un procedimiento secuencial de solución con la finalidad de desacoplarlo (Qin, 1995 y Qin et al., 1996); finalmente reportan experimentos numéricos para mostrar soluciones del modelo propuesto, así

como para investigar el comportamiento numérico del esquema de solución.

También desde la perspectiva de flujo fraccional, Chen y Ewing (1997) analizan las ecuaciones que gobiernan el flujo y transporte de sustancias en acuíferos: desde una sola fase, dos y tres fases, hasta el flujo composicional. Demuestran que estos tipos de flujos pueden ser descritos en términos de ecuaciones diferenciales parciales en una presión global y saturaciones. Indican que los procedimientos de elemento finito mixto pueden ser empleados para resolver de manera efectiva la relación de presión y velocidad. Finalmente en Chen et al. (1994), y también desde el contexto de flujo fraccional, se analizan diferentes condiciones de frontera de uso en hidrología subterránea y yacimientos petroleros.

Además de la perspectiva del flujo fraccional, existen enfoques alternativos para analizar el flujo y transporte multifásico y composicional. Forsyth (1993) y Unger et al. (1996) desarrollan simuladores para el transporte composicional en dos y tres fases, basados en aproximaciones de volumen finito. Russell (1995) presenta un estado del arte actual de la simulación del flujo multifásico. En el contexto de la industria petrolera se tienen los modelos de petróleo-negro, que permiten analizar y maximizar el proceso de recuperación o comportamiento productivo de yacimientos petroleros (Aziz y Settari, 1979; Camacho y Herrera, 1996; Huan, 1985 y Thomas et al., 1976). Existen aproximaciones similares a las del flujo fraccional basadas en métodos Eulerianos-Lagrangianos adjunto localizados (Dahle y Russell, 1995; Dahle, 1988 y Espedal y Ewing, 1987). En los trabajos clásicos Buckley y Leverett (1942) y Morel Seytoux (1973) se tratan de manera analítica el problema de direcciones características, en ausencia de efectos de capilaridad y gravitacionales en soluciones a problemas de yacimientos petroleros e hidrología subterránea. Bajo este enfoque se han realizado consideraciones más recientes por Morel Seytoux y Billica (1985 y 1988), mediante el uso de procedimientos estándar de diferencias finitas para resolver las ecuaciones de flujo fraccional 1D en fluidos incompresibles. Douglas (1983) y Espedal y Ewing (1987) presentan un procedimiento general basado en direcciones características. Dahle (1988), Celia y Binning (1992), Dahle et al. (1992) y Langlo y Espedal (1994) computacionalmente demuestran los beneficios del método de características en flujo 2D, bajo permeabilidad intrínseca variable. Hansen et al. (1992) tratan de manera sistemática el término de gravedad en la formulación de flujo fraccional. Por su parte, Chen et al. (1994) consideran el problema general de la implementación de condiciones de frontera. También se han desarrollado modelos de sistemas multifásicos basados en las relaciones de colisión de Boltzmann para k tipos de partículas moviéndose en la dirección z ; aproximaciones similares se relacionan con autómatas celulares (Paunov et al., 1996); dichos modelos han contribuido a lograr un mejor entendimiento de los mecanismos y la dinámica involucrada en el flujo y transporte en varias fases en medios porosos, fracturados o combinación de ambos. El-Kadi et al. (1991) mencionan que para el caso de la simulación numérica de NAPL's, los modelos pueden ser agrupados en: modelos de interfase abrupta, capilares y de partición de interfase. Para los primeros se efectúan simplificaciones en la descripción de la infiltración, intrusión y dispersión inicial y final, así como también sobre la migración del material disuelto (Mull, 1971 y Dracos, 1978); se supone que existen interfaces abruptas entre las diferentes fases, estos modelos permiten construir soluciones analíticas o semianalíticas

para la infiltración y subsecuente dispersión de los hidrocarburos en el tiempo. En los modelos capilares (Faust, 1985 y Kaluarachchi y Parker, 1988), y de partición (Baehr, 1987 y Abriola y Pinder, 1985), se acoplan el juego completo de ecuaciones que gobiernan el flujo y transporte multifásico, con las relaciones que describen la saturación y permeabilidad en un sistema no lineal de ecuaciones diferenciales; finalmente en la tercer categoría se incluye la partición de fases.

Capítulo II

Fenomenología de flujo y transporte inmisible. Ecuaciones constitutivas y de conservación

4 Introducción

Uno de los aspectos importantes de este capítulo es mostrar que existe una misma estructura formal subyacente entre el flujo y transporte miscible y el flujo en dos fases. El capítulo comienza con una discusión de la física del flujo inmisible, se introducen conceptos de interés relacionados con la descripción del flujo y transporte no miscible en acuíferos. Luego se procede a discutir la Ley de Darcy para el flujo y transporte en varias fases, así como el concepto de permeabilidad relativa, comentándose descripciones pictóricas de la ocurrencia del flujo simultáneo de varias fases en medios porosos. Enseguida se procede a comentar las ecuaciones de campo para el flujo y transporte miscible e inmisible. Se comienza con la descripción de las ecuaciones para el flujo y transporte de una sola fase miscible incompresible y ligeramente compresible. Luego se procede a discutir las ecuaciones de campo para dos fases, comentándose las formulaciones de tipo presión-presión y presión-saturación, que resultan de primordial importancia para establecer la estrategia de la descompisición del análisis del flujo en dos fases, mediante el análisis del flujo en velocidad y presión de una sola fase y el transporte de solutos en acuíferos. Finalmente y para concluir el capítulo se discute la estrategia de aproximación para el análisis del flujo en dos fases mediante el análisis del flujo y transporte de solutos en acuíferos.

El objetivo de este trabajo tiene que ver con la formulación física y establecimiento de procedimientos de solución numérica de las ecuaciones de campo del flujo bifásico con especial interés en sistemas de flujo subterráneo. La conexión de la investigación con los aspectos prácticos de la calidad del agua se da debido a que la normatividad, NOM-127-SSA1 (1994), impone restricciones sobre las concentraciones máximas admisibles para cada uso del agua.

Los procesos de rehabilitación, que incluyen las regiones saturadas y capilares, se realizan mediante: la extracción del agua contaminada, la infiltración de sustancias que provocan conversiones químico-biológicas, o el cambio de las propiedades físicas (como la viscosidad) para facilitar la movilidad. Los procedimientos numéricos permiten evaluar la eficiencia de las diferentes técnicas y estrategias, así como también permiten sugerir procedimientos complementarios (Martínez Nájera, 2002 y Martínez Nájera et al., 2005). Los modelos físicos y numéricos describen procesos complejos, que ocurren en los sistemas reales, reducidos a sus aspectos esenciales. Los modelos incluyen primeramente relaciones de balance de masa y energía, así como: saturaciones, composiciones, transiciones e interacción entre fases (tales como la disolución, vaporización, absorción y reacción). Los modelos que reúnen las características señaladas son de tipo multifásico y composicional. En este capítulo se presenta la fenomenología del flujo y transporte miscible e inmisible, así como las ecuaciones de conservación y constitutivas para este tipo de sistemas.

En el estudio del movimiento de fluidos en el subsuelo poroso, fracturado o combinación de ambos, en general se pueden esperar dos posibilidades de flujo: la primera es cuando los fluidos son solubles el uno en el otro, en este caso la tensión de interfase entre ellos es cero y se disuelven entre sí; la segunda se presenta cuando los fluidos son inmiscibles, en esta situación la tensión de interfase fluido-fluido es no cero y existe una frontera que los separa, lo anterior presupone la existencia de una presión capilar en cada punto de la interfase. En el caso de flujo miscible las componentes disueltas se mueven con el campo de flujo del agua y posiblemente mantienen cadenas de reacción química en el sistema agua-suelo residente; sin embargo, cuando dos fluidos no miscibles coexisten en una misma región, es posible suponer que están separados por una interfase abrupta, en donde a cada lado de ella se tiene la presencia de una sola fase. La suposición no necesariamente es correcta debido a que pueden existir zonas de transición, debidas a la dispersión hidrodinámica y molecular, a través de las cuales la composición varía de un tipo de fluido al del otro tipo; en este caso también es posible que ocurran cadenas de reacción química e intercambio de masa entre los sistemas agua-suelo-fases. El flujo simultáneo miscible o inmisible de dos o más fluidos en acuíferos puede ocurrir en las siguientes situaciones: en yacimientos petrolíferos, en donde coexisten el petróleo, agua y gas; en la zona vadosa o parcialmente saturada, donde los fluidos son el agua y el gas (p.e. aire); en la intrusión salina, aunque el agua salada y dulce son solubles existe una interfase que las separa debido a diferencias de densidad o peso específico; en general en donde intervienen diferentes calidades tanto físicas como químicas de agua, lo que puede determinar un flujo casi-inmisible (p.e. en la vecindad del vertido de aguas residuales y lixiviados, plumas térmicas, derrames, etc.), mediante el movimiento de elementos traza; también se presenta en la contaminación de suelos y flujo subterráneo por hidrocarburos, en donde coexisten la gasolina o petróleo y sus componentes, agua y gas.

Una clase importante de líquidos parcialmente solubles en agua lo conforman los NAPL (siglas del término en inglés: nonaqueous phase liquids); los de densidad superior y viscosidad menor a la del agua se les llama DNAPL (del término inglés: dense NAPL), y a los de densidad inferior y viscosidad superior a la del agua se les denota como LNAPL (del término: light NAPL), Abriola y Pinder, 1985. En el caso

DNAPL puede ocurrir flujo bifásico debajo del nivel potenciométrico (McWhorter y Sunada, 1990), puede ser trifásico debajo o inmediatamente sobre el nivel piezométrico si se considera a los LNAPL; por su parte en la zona no saturada, de acuerdo con Abriola y Pinder (1985), puede ocurrir el flujo de las tres fases: agua, aire y (L, D)NAPL. Baehr (1987) indica que, en la zona vadosa los NAPL se particionan en el aire como fase de vapor. En general, se pueden tener diferentes cadenas de reacción de los (L, D)NAPL con el sistema: gas, líquido y matriz sólida residentes en el subsuelo. Abriola y Pinder (1985) indican que cada compuesto, de los (L,D) NAPL, posee propiedades físicas y químicas específicas, y que se sujetan a las condiciones de absorción y combinación física, química o biológica mediante procesos extremadamente complejos. Los LNAPL más comunes son la gasolina y el combustible diesel. Los DNAPL incluyen los hidrocarburos clorados y halogenados, como el Tricloroetileno (TCE) y el Pentaclorofenol. Los NAPL y demás contaminantes forman parte de los productos de entrada, transición y terminal de diversos procesos industriales; por lo general se encuentran en el subsuelo debido a fugas de tanques subterráneos fracturados, depósitos de desechos industriales y municipales, derrames accidentales o deliberados ocurridos en la superficie del terreno o diferentes profundidades del mismo (Gorelick et al., 1993).

La traslación y dispersión de contaminantes en el subsuelo sigue diferentes trayectorias dependiendo de su origen, propiedades, tipo y cualidades del sistema acuífero involucrado y características específicas del mismo suelo (Fetter, 1993). Al tener situaciones de líquidos inmiscibles o ligeramente solubles en el agua residente, que se manifiestan como fases individuales, su análisis se realiza atendiendo los aspectos multifásicos del sistema. Las sustancias contaminantes pueden ser de origen orgánico como los combustibles (petróleo, combustóleo, etc.) y solventes, o bien pueden ser agentes de enfriamiento y detergentes (hidrocarburos clorados), Gorelick et al., 1993. Los NAPL son ligeramente solubles con tensión superficial más pequeña que la del agua. Los (L y D) NAPL son sustancias hidrofóbicas que se infiltran, trasladan y dispersan en el suelo de manera diferente a la del agua. Los LNAPL se infiltran verticalmente por la región no saturada, debido a la acción gravitatoria y presión capilar; mantienen también desplazamientos horizontales debido al agrupamiento típico por capas y empaquetamientos de los diferentes materiales que conforman el subsuelo, así como por efectos capilares; una vez que alcanzan el nivel piezométrico forman lentes que ocupan regiones inmediatas arriba de dicho nivel; a partir de entonces su desplazamiento es esencialmente horizontal, con tendencia a seguir el patrón local de flujo subterráneo. Debido a que los LNAPL son ligeramente solubles, en la región saturada, se forma una zona de mezcla debajo del lente de hidrocarburos; debido a que contienen componentes volátiles, también se establecen zonas de vapores hacia la región no saturada. Por su parte, el movimiento de los DNAPL por la franja parcialmente saturada es análogo a la de los LNAPL; sin embargo y debido a que son líquidos más pesados que el agua, continúan moviéndose hacia abajo luego de alcanzar el nivel saturado; dependiendo de la distribución de las capas impermeables del medio, pueden moverse aún en contra de la dirección del flujo subterráneo. Debe de ser observado que la heterogeneidad y fracturamiento influencia de manera decisiva el movimiento de los (L,D) NAPL y cualquier otro tipo de contaminante en el subsuelo (Fetter, 1993; Gorelick et al., 1993 y Faust, 1985).

La presencia de pequeñas cantidades de NAPL's en el agua puede alterar dramáticamente la calidad requerida para un uso determinado, al no satisfacer los límites establecidos por los estándares normativos NOM-127-SSA1 (1994). Es entonces cuando es necesario: evaluar el impacto de los contaminantes, caracterizar hidrogeológicamente los sistemas afectados, conocer los usos específicos de las fuentes y reglamentos existentes. Para proponer estrategias de rehabilitación, Martínez Nájera (2002 y 2005), se incluye la participación de disciplinas como: Geología, Geofísica, Topografía, Hidrología de Superficie y Subterránea, Climatología, Análisis Matemático y Numérico de Sistemas, Leyes del uso del agua, Economía, Políticas, Aspectos Sociales, Hidrogeoquímica, Sistemas de Información, etc. En general las técnicas de rehabilitación requieren de los procedimientos de simulación numérica que amplían los enfoques de trabajo, ya que permiten analizar racionalmente las diferentes opciones o estrategias en modelos matemáticos que simulan el comportamiento de los sistemas reales.

A continuación se exponen los conceptos relevantes necesarios para la descripción de las ecuaciones de campo de conservación miscible e inmisible. Uno de los aspectos importantes de este capítulo es mostrar que existe una misma estructura formal subyacente entre el flujo y transporte miscible y el flujo en dos fases (Chen et al., 1994; Chen y Ewing, 1997 y 1998). En la descripción del fenómeno de flujo y transporte miscible, inmisible y composicional en el subsuelo (poroso, fracturado o combinación de ambos) se debe distinguir la dependencia de las variables de estado con la escala; la mayoría de las variables tienen origen molecular, sin embargo no es posible una descripción de este tipo (1 gramo de agua contiene unas 3×10^{22} moléculas). Por otra parte, si se conocen las características e interacciones moleculares, es posible deducir propiedades macroscópicas tales como: viscosidad, densidad, coeficientes de difusión, miscibilidad y solubilidad, tensiones capilares y de interfase, etc.

5 Ley de Darcy y permeabilidad relativa

En el flujo simultáneo inmisible, el espacio del poro es compartido por cada una de las fases. En uno de los modelos conceptuales adoptados se considera que cada fluido establece sus propias trayectorias sobre el medio, las cuales forman canales tortuosos estables; en este caso se supone que se determinan sistemas de canales únicos para cada nivel de saturación. Si se considera el caso en que se reduce la saturación de un fluido no mojante S_a que inicialmente fluye con otro mojante S_w , entonces los canales del fluido no mojante tienden a romperse hasta que quedan regiones aisladas en la saturación irreducible no mojante S_{a0} . Similarmente, cuando S_w disminuye los canales del fluido mojante tienden a ser discontinuos en la saturación irreducible mojante S_{w0} (Bear, 1972; Buckley y Leverett, 1942; Burdine, 1953 y Corey, 1986). Cuando la distribución del fluido se hace discontinua en el medio poroso, entonces ya no se da su flujo al no existir la presión de la fase.

El movimiento de una de las fases en un punto dado, se ve afectado por la saturación de las otras fases en la vecindad del mismo punto; la presión de fase solamente existe a partir de cierta magnitud de

saturación (funicular), abajo de la cual se puede dar el movimiento de fase sólo por arrastre y presión de las restantes (Bear, 1972; Falta, 1990). A cada fase se le asocia una presión capilar la cual provee la energía necesaria para que se de el movimiento de la misma; de este modo el movimiento de una fase se debe: al efecto de su propia presión, y al arrastre de otras fases o combinación de ambos. Los fluidos o fases compiten por el espacio disponible de flujo; el espacio disponible para cada fase siempre es menor que el espacio total del poro. Debido a que el movimiento de una fase es afectado por su propia presión, así como por la saturación y presión de las fases restantes. Parece natural también suponer que el flujo de la fase α en un punto dado depende de su saturación, ya que parte del poro puede estar ocupado por otras fases, la permeabilidad se reduce con respecto a la fase. La hipótesis fundamental de trabajo en el estudio del flujo multifásico consiste en suponer que cada fluido de fase α obedece por separado la Ley de Darcy, con una corrección en el término de permeabilidad (Bear, 1972; Bear et al., 1968; Falta, 1990 y Corey, 1986),

$$\mathbf{u}_\alpha = -\frac{\mathbf{k}k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}), \quad (1)$$

donde \mathbf{u}_α es la descarga específica o flujo unitario de la fase $\alpha = w$ mojante, $\alpha = a$ no mojante, las unidades de \mathbf{u}_α son [L/T; m/seg], la velocidad promedio o de Darcy se obtiene dividiendo la relación anterior por la porosidad ϕ del medio; \mathbf{k} es la permeabilidad absoluta o intrínseca del medio, en su forma más general es un tensor simétrico de segundo rango, con unidades [L²; cm²]; $k_{r\alpha}$ la permeabilidad relativa de la fase mojante y no mojante, con unidades [L²/L²; cm²/cm²]; \mathbf{g} la constante gravitacional, con las unidades habituales [L/T²; m/seg²]; p_α, ρ_α , y μ_α la presión capilar, densidad y viscosidad de fase, respectivamente. Las unidades de ρ_α , y μ_α son [M/L³; gr/cm³] y [Pa·T=M/LT; gr/cm·seg], respectivamente. La permeabilidad relativa $k_{r\alpha}$ depende de la saturación de fase, S_α , y satisface la relación,

$$0 \leq \sum_{\alpha} k_{r\alpha}(S_\alpha) \leq 1. \quad (2)$$

Numerosos experimentos (Scheidegger, 1960 y Bear, 1972), validan la ecuación anterior como buena hipótesis de trabajo; más aún y efectivamente, se establece que la permeabilidad relativa de la fase α , en un punto dado, depende de la saturación de la misma.

La presión capilar p_c se define por la relación,

$$p_c(S_w) = p_a - p_w. \quad (3)$$

En donde p_a es la presión existente en la fase no mojante (p.e. petróleo, diesel, gasolina, (L, D) NAPL o gas), y p_w la existente en la fase mojante (p.e. agua). La presión capilar depende de: la tensión de

interfase, de la geometría de granos y poros, características físicas y químicas de los fluidos participantes y del suelo, condiciones de presión y temperatura, así como de la saturación de las fases. Las unidades de p_c son $[M/LT^2; \text{gr/cm.seg}^2]$.

La Ley de Darcy (1) es la relación constitutiva fundamental del flujo y transporte miscible, inmisible y composicional del movimiento de fases en el subsuelo. Establece el balance de momentum para cada fase α ; Whitaker (1966 y 1986) indica que puede ser derivada a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos efectuando promedios de las velocidades de fase, sobre los volúmenes representativos. Para el caso de una sola fase sólo se prescinde del subíndice en α . La Figura 1a muestra la permeabilidad relativa típica, en el flujo simultáneo de un líquido mojannte y otro no mojannte. Ambos fluidos están en movimiento sólo en el intervalo de saturación $(S_{w0}, 1 - S_{a0})$ de la fase mojannte, extremos que corresponden con las saturaciones irreducible para la fase mojannte y residual de la fase no mojannte. En S_{a0} , k_{rw} es normalmente mucho menor que 1; mientras que k_{ra} en S_{w0} se aproxima a 1. Al punto A, de la misma figura, en donde $S_w = 1 - S_{a0}$ se le denomina saturación de equilibrio. La caída rápida de k_{rw} indica que los poros grandes son primeramente ocupados por la fase no mojannte; cuando S_a aumenta, el promedio de tamaños de poros saturados por el fluido mojannte disminuye progresivamente, lo que se demuestra por el crecimiento rápido de k_{ra} ; es decir, arriba S_{a0} el líquido no mojannte ocupa más poros que el mojannte.

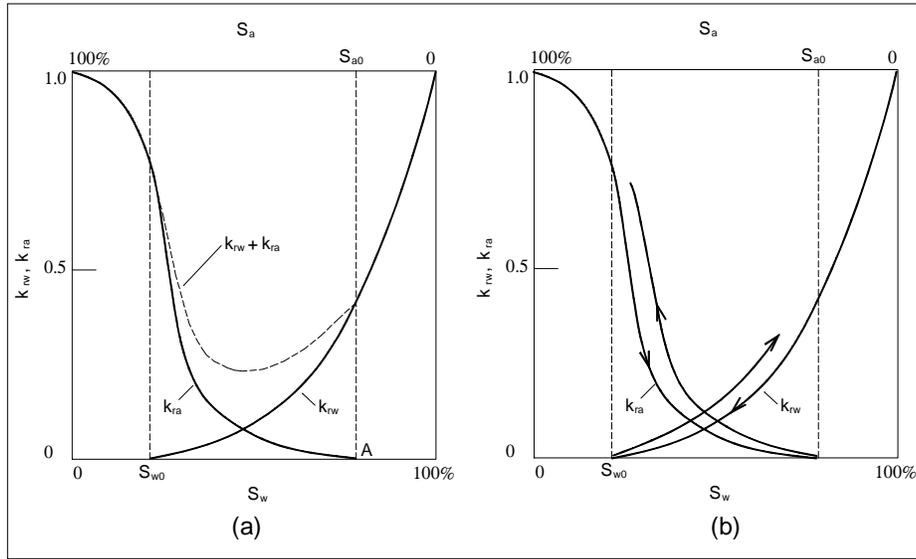


Figura 1. Relaciones de la permeabilidad relativa con la saturación (Figura tomada de Fetter, 1993).

Se ha evaluado experimentalmente a la permeabilidad relativa para diferentes suelos, fluidos y parámetros de flujo (Brooks y Corey, 1964; Corey, 1954 y Lenhard y Parker, 1987). Una observación es que uno de los fluidos puede mojar preferentemente a los granos o fracturas y adherirse a las paredes, por lo que el no mojannte se rodea siempre por el mojannte en los poros del medio; entonces se puede pensar en un flujo simultáneo concéntrico de tipo Poiseuille (Bear, 1972), para la fase no mojannte, por lo que el concepto de que cada fluido establece sus propios canales estables es cuestionable. La permeabilidad relativa hereda

un comportamiento histerético debido a la mojabilidad y presión capilar, Figura 1b. La figura presenta la variación típica de la permeabilidad relativa con la magnitud de saturación para un sistema de dos fases, tales como: petróleo-agua, gas-petróleo, agua-gas, etc.

La permeabilidad relativa también es dependiente de los gradientes de presión. No se tienen conclusiones definitivas al respecto, pero los datos disponibles de acuerdo con Muskat (1937, 1949 y 1934), para sistemas agua-petróleo la permeabilidad de la fase no mojante aumenta con los gradientes de presión. El no tomar en cuenta este efecto, aún se considera como aproximación adecuada (Bear, 1972). Otra de las variables independientes de la permeabilidad relativa es la diferencia de viscosidad entre los fluidos, se dice que esto es evidenciado por el hecho de que $(k_{rw} + k_{ra}) < k$, Figura 1a; sin embargo, también ocurre un efecto diferente y hasta cierto punto contrario al anterior, cuando $k_{ra} > k$ en el caso de petróleo no mojante, siempre que se tenga inicialmente una saturación pendular de agua, es decir, el agua actúa como lubricante. Rose (1960), muestra que la viscosidad (la razón μ_w/μ_a) tiene un efecto de segundo orden sobre la permeabilidad relativa. Lo anterior hace evidente que la permeabilidad relativa puede depender de diversos factores, así como de la saturación. Los datos experimentales sugieren que la hipótesis de que la permeabilidad relativa depende sólo de la saturación, para propósitos prácticos es una buena aproximación (Bear, 1972).

Scheidegger (1960), Pirson (1958) y Amyx et al. (1960) listan diferentes métodos experimentales para determinar la permeabilidad efectiva y relativa a partir de muestras de suelos y diferentes fluidos participantes. Constantz (1982) reporta que la temperatura tiene efectos en la permeabilidad relativa debido a que influye a la viscosidad dinámica de los fluidos participantes; Philip y de Vries (1957) basados en la teoría capilar consideran que la temperatura puede modificar los valores de los diferentes parámetros hidráulicos, debido a que puede influenciar la tensión superficial y de interfase de los fluidos en cuestión. De acuerdo con Green et al. (1986) es posible determinarla mediante diferentes métodos de campo; Klute y Dirksen (1986) exponen algunas técnicas de laboratorio. Otros procedimientos pueden combinar resultados de campo con técnicas de inversión no lineal, de acuerdo con Marquardt (1963) y Simunek y van Genuchten (1996). Las estimaciones se obtienen de modelos conceptuales del medio poroso, sin embargo no evaden los experimentos con los que se determinan coeficientes introducidos en el desarrollo teórico. Por ejemplo Wyllie y Gardner (1958) construyen un modelo a partir de un arreglo de tubos capilares de diferente radio r ($r_1 < r < r_2$); los cuales son particionados en rebanadas delgadas que son después rotadas y reordenadas de manera aleatoria; las expresiones estimadas para k , k_{rw} y k_{ra} coinciden con las obtenidas por Burdine (1953) con un modelo basado en la distribución de tamaños de poro; de manera similar se tienen los trabajos de Mualem (1976) y van Genuchten (1980). Existen dos tendencias generales: la primera consiste en obtener de manera experimental la relación de la permeabilidad relativa con la saturación efectiva o reducida; la segunda busca derivar esta dependencia a partir de los modelos hidráulicos expresados por las funciones de la presión capilar como función de la saturación $p_c(S_w)$ en unión con modelos conceptuales del medio sólido. Dentro de la última opción se tienen las caracterizaciones de Burdine (1953) y Mualem (1976), con las parametrizaciones $p_c(S_w)$ de Brooks y Corey (1964) y van Genuchten (1980), respectivamente.

A partir de la fuerte evidencia experimental, acerca de la relación entre la presión capilar y la saturación reducida (S_e), así como con el uso de los resultados de Wyllie y Gardner (1958) y Burdine (1953) para k_{rw} y k_{ra} , Brooks y Corey (1964) obtienen las expresiones,

$$\begin{cases} k_{rw} = (S_e)^{(2+3\lambda)/\lambda} = \left(\frac{p_b}{p_c}\right)^{(2+3\lambda)/\lambda}, & p_c \geq p_b \\ k_{ra} = (1 - S_e)^2 (1 - S_e^{(2+\lambda)/\lambda}) = \left[1 - \left(\frac{p_b}{p_c}\right)^\lambda\right]^2 \left[1 - \left(\frac{p_b}{p_c}\right)^{2+\lambda}\right] \end{cases} \quad (4)$$

Donde el índice de tamaños de poros, λ , es una constante experimental. Por su parte, el modelo hidráulico de van Genuchten (1980) en unión con el modelo de suelo de Mualem (1976), conduce a las expresiones,

$$\begin{cases} k_{rw} = S_e^{1/2} \left[1 - \left(1 - S_e^{1/m}\right)^m\right]^2 \\ k_{ra} = (1 - S_e)^{1/3} \left[1 - S_e^{1/m}\right]^{2m} \end{cases} \quad (5)$$

Donde m es el parámetro experimental de van Genuchten (1980); también expresa la permeabilidad relativa en unidades de longitud [L; cm], h , mediante la siguiente relación,

$$k_r(h) = k_s \frac{\left\{1 - (\gamma h)^{n-1} [1 + (\gamma h)^n]^{-m}\right\}^2}{[1 + (\gamma h)^n]^{m/2}}. \quad (6)$$

Donde k_s es la conductividad hidráulica saturada con unidades [L/T; m/seg].

De este modo se tienen relaciones entre p_c , S_e , k_{rw} y k_{ra} apoyadas por suficientes evidencias experimentales. No debe de olvidarse que los coeficientes λ , p_b (presión de burbuja) y S_{w0} (saturación irreducible) son determinados mediante pruebas de laboratorio; así como los parámetros m , n y γ .

Así por ejemplo, Lin et al. (1982) determinan experimentalmente la permeabilidad relativa en arena fina con la presencia de TCE y agua. Con respecto a las relaciones de permeabilidad relativa para sistemas de tres fases: agua (w), (L,D)NAPL (o) y gas (g); se tiene que son más complejas que las encontradas para el caso de dos fases. Leverett y Lewis (1941) realizaron experimentos para determinar la permeabilidad relativa en sistemas de tres fases. Demostraron que la permeabilidad relativa del agua depende únicamente de la saturación del agua; debido a su mayor afinidad con el suelo llena los poros más pequeños, dejando el resto del espacio disponible para las fases (L,D)NAPL y gas. La permeabilidad relativa de las fases no mojantes sí depende de la saturación de las tres fases participantes. Se han desarrollado principalmente dos aproximaciones para establecer cuantitativamente la relación funcional entre las permeabilidades relativas y saturaciones en sistemas de tres fases: la de Stone (1970 y 1973), que incluye dos modelos; y la de Parker

y Lenhard (1987) y Lenhard y Parker (1988). La relación de permeabilidad relativa para el NAPL, k_{ro} , se calcula usando las encontradas para sistemas de dos fases agua-NAPL y NAPL-gas. En Aziz y Settari (1979) y Croisé y Helmig (1995) se establecen los dos modelos de Stone (STOIa, STOIb, STOIa y STOIb) en el contexto de los modelos de Mualem (1976) y van Genuchten (1980).

Las relaciones Stone y Parker-Lenhard son válidas en procesos primarios de drenaje en sistemas de tres fases (en el desplazamiento simultáneo del agua por el NAPL, y del NAPL por la fase gaseosa; Stone (1970 y 1973), Parker y Lenhard (1987) y Lenhard y Parker (1988)). La infiltración del NAPL por la zona no saturada es un proceso mojante del sistema NAPL-aire; en este evento, es posible suponer que no existen efectos de histéresis, sin que se incurra en ninguna falta. En el caso de la infiltración del agua en suelo no saturado contaminado por NAPL, según lo indican Lenhard et al. (1993), sí se deben tomar en cuenta los efectos de histéresis en los ciclos de las relaciones $p_c - S$ y $k_{ro} - S$. Las relaciones $k_{ro} - S$ consideradas son válidas para NAPL's que se extienden y redistribuyen sobre superficies sólidas; los líquidos que no tienen esta característica no pueden ser descritos por conceptos teóricos, Kalaydjian et al. (1993), debido a la fuerte discontinuidad de la fase.

6 Ecuaciones de balance de flujo y transporte miscible e inmisible

En las siguientes secciones se discuten las ecuaciones de balance masa y energía que gobiernan el flujo y transporte en medios porosos de una sola fase y del flujo de dos fases. En la primera parte se presentan las relaciones que rigen el comportamiento del flujo de una sola fase, para continuar con el transporte miscible; luego, desde la perspectiva de flujo fraccional, se presentan las ecuaciones de balance de flujo bifásico, las formulaciones de tipo presión-presión y presión-saturación. Finalmente se presenta la estrategia del trabajo subsecuente, así como los tipos de problemas a resolver y espacios involucrados.

6.1 Flujo de una sola fase y transporte miscible

Se describe el flujo de un fluido que conforma una sola fase en un acuífero que ocupa la región del espacio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, durante un intervalo de tiempo $(0, T)$; suponemos que la densidad de dicho fluido es ρ y que está sujeto a una presión p . Si además suponemos que el flujo se da en condiciones isotérmicas, las ecuaciones de balance usuales que describen este tipo de movimiento monofásico, de acuerdo con Bear (1972), están dadas por:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial(\phi(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t))}{\partial t} + \text{div}(\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) &= \rho(\mathbf{x}, t)q(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= -\frac{k(\mathbf{x})}{\mu(\mathbf{x})}(\nabla p(\mathbf{x}, t) - \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{g}) \end{aligned} \right\} (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \quad (7)$$

Donde ϕ y k son la porosidad y la permeabilidad absoluta del sistema material, \mathbf{u} el campo vectorial de la descarga específica, μ es la viscosidad del fluido, \mathbf{g} la constante gravitacional, q los términos de

fuente/sumidero de la fase. En adelante se omiten las variables independientes. Si suponemos que la densidad del fluido satisface la ecuación de estado (Ewing, 1995 y Chen y Ewing, 1997):

$$\frac{d\rho}{\rho} = z dp, \quad (8)$$

donde z es el factor incompresibilidad. Empleando la ecuación (8) en las relaciones (7), se obtiene el siguiente sistema equivalente:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{u}') &= \rho q \\ \mathbf{u}' &= -\frac{k}{z\mu} (\nabla\rho - z\rho^2 \mathbf{g}) \end{aligned} \right\} (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \quad (9)$$

En el Apéndice se presenta una deducción de estas relaciones. La descarga específica del fluido, \mathbf{u} , ecuación (7)₂; o la velocidad modificada \mathbf{u}' , como esta indicada en la ecuación (9)₂ anterior, son de suma importancia en las situaciones prácticas; ya que el flujo y transporte de solutos esta fuertemente influenciado por las variaciones de este campo vectorial. Por tal motivo es necesario considerarla de manera especial en los esquemas de solución numérica de las ecuaciones de balance de masa, tal y como se proponen en este trabajo. A nivel micro y macroscópico puede ser no diferenciable, como la permeabilidad k ; estas variables dependen de las discontinuidades naturales de las formaciones geológicas dentro de las cuales se da el flujo y el transporte. Naturalmente, aquí hemos de dar por descontado que el esfuerzo de toda modelación matemática al respecto también depende de la calidad de las determinaciones de los parámetros de campo. Los procedimientos de solución numérica que proponemos toman en cuenta las variaciones abruptas de la descarga específica en la Ley de Darcy y demás parámetros, de modo tal que los resultados de la modelación sean acordes con el flujo observado en acuíferos reales.

A continuación se presentan las ecuaciones de balance para el transporte miscible en una sola fase. En este caso se supone que el trazador se mueve por el campo de movimiento del líquido, los términos que determinan el desplazamiento son los de convección y dispersión (Bear, 1972 y Martínez Nájera, 1992), además de los aspectos geológicos del medio y condiciones de frontera del campo de flujo y transporte, por supuesto sin descontar las cadenas de reacción de los solutos existentes. Habremos de suponer que el transporte se da en condiciones isotérmicas y que el medio material permanece fijo con respecto a un sistema de referencia inercial. También supondremos que no existen cambios de volumen como resultado de la mezcla de los solutos participantes.

Denotamos por c_i a la concentración volumétrica [M/L³; mg/m³] del *i*'ésimo componente químico en el flujo; donde $i = 1, \dots, N$ es número total de componentes. De este modo la conservación de masa para el *i*'ésimo componente en la mezcla, está dado por la expresión (Ewing, 1995):

$$\frac{\partial(\phi\rho_i c_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_i c_i \mathbf{u}) - \operatorname{div}(\rho_i \mathbf{D} \nabla c_i) = \rho_i c_{iq} q, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T). \quad (10)$$

Donde se satisface la relación de Darcy, que está dada por la ecuación (7)₂. $c_{iq}(\mathbf{x}, t)$ denota la concentración del *i*'ésimo componente en una fuente externa; mientras que $\mathbf{D}(\mathbf{x})$ es el tensor de dispersión en el acuífero que en su forma general (Scheidegger, 1960 y Bear 1972), puede caracterizarse mediante:

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \phi \{ d_m \mathbf{I} + |\mathbf{u}| (d_l \mathbf{E}(\mathbf{u}) + d_t \mathbf{E}^\perp(\mathbf{u})) \}.$$

Donde \mathbf{I} es el tensor identidad de 3x3; $[\mathbf{E}(\mathbf{u})]_{jk} = \left\{ \frac{u_j u_k}{|\mathbf{u}|^2} \right\}$ son las componentes del tensor de dispersión de 3x3, proveniente de las proyecciones ortogonales a lo largo del vector velocidad y $\mathbf{E}^\perp(\mathbf{u}) = \mathbf{I} - \mathbf{E}(\mathbf{u})$ su complemento ortogonal; d_m es el coeficiente de difusión molecular; d_l y d_t son los coeficientes de dispersión mecánica longitudinal y transversal, respectivamente. Los términos c_{iq} se especifican en las posiciones y tiempos donde existen fuentes o sumideros para el componente *i*'ésimo; c_i es igual a c_{iq} en los puntos de producción.

Supondremos ahora que la densidad ρ_i depende sólomente de la presión p , y que se satisfacen ecuaciones de estado similares a la (8),

$$\frac{d\rho_i}{\rho_i} = z_i dp, \quad (11)$$

donde z_i es el factor incompresibilidad para el *i*'ésimo componente. Desarrollando los términos de la ecuación (10), con el empleo de (11) y las siguientes relaciones:

$$\sum_{i=1}^N c_i = \sum_{i=1}^N c_{iq} = 1, \quad (12)$$

se obtiene la siguiente ecuación en términos de la presión,

$$d(c_1, \dots, c_N) \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} + \mathbf{b}(c_1, \dots, c_N, \mathbf{u}) \cdot \nabla p = q, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T). \quad (13)$$

Donde,

$$\left\{ \begin{array}{l} d(c_1, \dots, c_N) = \sum_{i=1}^N \phi z_i c_i, \quad y \\ \mathbf{b}(c_1, \dots, c_N, \mathbf{u}) = \sum_{i=1}^N z_i (c_i \mathbf{u} - \mathbf{D} \nabla c_i) \end{array} \right.$$

en el Apéndice se da una deducción de la relación (13). En este nivel debe de notarse la dependencia de los términos de convección y dispersión con la velocidad del fluido \mathbf{u} . Los procedimientos de solución numérica que se proponen en este trabajo producen aproximaciones bastante exáctas para este vector. Existe gran cantidad de trabajos encaminados a proponer soluciones numéricas efectivas a la ecuación de transporte miscible (Douglas et al., 1983; Alduncin y Carrera, 1991; Martínez Nájera, 1992 y 2002; Ikeda, 1983 y Celia et al., 1990). La naturaleza parabólica de la ecuación de balance de masa (10), cuando el término advectivo domina sobre el de difusión, es la causa de que los esquemas clásicos de solución numérica den soluciones físicamente inadmisibles; debido a que las versiones numéricas de (10), no satisfacen el principio de máximo y algunas veces, tampoco el de conservación de masa discretos. Por tal motivo y para subsanar esta deficiencia, al término advectivo se le procesa mediante técnicas de upwind parcial, que sí satisfacen los principios de máximo y de conservación de masa (Ikeda, 1983), y que dan como resultado soluciones físicamente realistas. En el siguiente capítulo se discute con detalle la estrategia desarrollada en este proyecto para dar solución al problema de transporte miscible.

6.2 Conceptos de flujo fraccional para describir el flujo bifásico

Se establecen los aspectos básicos de flujo fraccional para analizar el flujo simultáneo de dos fases. Como es usual, sea $\Omega \in \mathbb{R}^3$ la región ocupada por un medio poroso cualesquiera, durante un intervalo de tiempo $(0, T)$. Las ecuaciones de balance de masa que describen el flujo inmisible bifásico, para cada fase α en Ω , están dadas por (Chen y Ewing, 1997 y 1998),

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial(\phi(\mathbf{x}, t)\rho_\alpha(\mathbf{x}, t)S_\alpha(\mathbf{x}))}{\partial t} + \text{div}(\rho_\alpha(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x}, t)) = \rho_\alpha(\mathbf{x}, t)q_\alpha(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{k(\mathbf{x})k_{r\alpha}(\mathbf{x})}{\mu_\alpha(\mathbf{x})}(\nabla p_\alpha(\mathbf{x}, t) - \rho_\alpha(\mathbf{x}, t)\mathbf{g}) \end{array} \right\} (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \quad (14)$$

Véase la Ley de Darcy para el flujo multifásico establecida en la ecuación (1). Donde $\alpha = w$ denota a la fase mojanete, y $\alpha = a$ a la fase no mojanete; ϕ y k son la porosidad y la permeabilidad absoluta del sistema geológico sobre el que se emplaza el acuífero, en general son función de la posición; $\rho_\alpha, S_\alpha, p_\alpha, \mathbf{u}_\alpha$ y μ_α son la densidad, saturación, presión, descarga específica y viscosidad de la fase α' ésima, respectivamente; q_α es el término fuente/sumidero de la fase α ; $k_{r\alpha}$ es la permeabilidad relativa de la fase α ; y \mathbf{g} es el vector de la constante gravitacional. El enfoque que se presenta se denomina de flujo fraccional. En adelante se suprimen, tanto como sea posible las variables independientes. Se impone la restricción sobre las saturaciones $(??)_1$,

$$S_w + S_a = 1. \quad (15)$$

Se considera que la presión capilar es función de la saturación, ecuación (3),

$$p_c(S_w) = p_a - p_w. \quad (16)$$

Donde en general la saturación es función del espacio y del tiempo. Se introduce la función de movilidad de fase mediante la siguiente relación, Chavent y Jaffré (1986), Chen y Ewing (1997 y 1998),

$$\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}\rho_\alpha}{\mu_\alpha}, \quad \alpha = w, a. \quad (17)$$

Y a la movilidad total por,

$$\lambda = \lambda_w + \lambda_a. \quad (18)$$

Finalmente se define al flujo fraccional mediante las relaciones,

$$f_\alpha = \frac{\lambda_\alpha}{\lambda}, \quad \alpha = w, a. \quad (19)$$

6.2.1 Formulación tipo presión-presión

Si sustituimos (15)-(17) en (14)₁ y (14)₂ se obtiene la formulación usual de tipo presión-presión. Las condiciones de frontera comunmente encontradas en esta formulación son de los tres tipos principales (Arbogast, 1992 y Chavent y Jaffré, 1986). Para fines descriptivos de dichas condiciones sea $\partial\Omega$, la frontera de Ω , la unión de tres conjuntos disjuntos Γ_i , $i = 1, 2, 3$, y $\Gamma_3 = \cup_j \Gamma_{3,j}$ en donde cada $\Gamma_{3,j}$ esta conectado. Entonces tomando $\alpha = w, a$ y $S = S_w$,

$$\left\{ \begin{array}{ll} p_\alpha = p_{\alpha D}(\mathbf{x}, t), & \mathbf{x} \in \Gamma_1, \quad t > 0 \\ \mathbf{u}_\alpha \cdot \boldsymbol{\nu} + b_\alpha(\mathbf{x}, t, S)p_\alpha = g_\alpha(\mathbf{x}, t, S), & \mathbf{x} \in \Gamma_2, \quad t > 0 \\ \int_{\Gamma_{3,j}} (\mathbf{u}_w + \mathbf{u}_a) \cdot \boldsymbol{\nu} = g_j(t), & \mathbf{x} \in \Gamma_{3,j}, \quad t > 0 \\ p_\alpha = p_{\alpha D}(\mathbf{x}, t) + d_j(t), & \mathbf{x} \in \Gamma_{3,j}, \quad t > 0 \\ S_w(\cdot, 0) = S_w^0, & \mathbf{x} \in \Omega \end{array} \right. \quad (20)$$

Donde $p_{\alpha D}, b_{\alpha}, g_{\alpha}$ y g_j son funciones dadas, d_j es una constante arbitraria de escalamiento; $\boldsymbol{\nu}$ es la normal unitaria a $\partial\Omega$; y S_w^0 es la condición inicial para la saturación mojante. Con esto se completa el problema de valores inicial y a la frontera asociado a la formulación presión-presión.

Sin embargo, como puede ser observado, formalmente el problema bifásico mostrado en (14)_{1,2} no es similar a los problemas de flujo y transporte previamente discutidos, por lo que no se pueden aplicar los procedimientos de solución desarrollados para el flujo y transporte monofásico. Una importante alternativa es transformar a las ecuaciones del flujo bifásico en ecuaciones similares a las de flujo y transporte monofásico, con el fin de aplicar los métodos numéricos de solución ya desarrollados para estas últimas; para lo que se redefine la presión global y velocidad total del sistema en consideración, esto se discute con detalle en la siguiente sección.

6.2.2 Formulación tipo presión-saturación

En esta sección se reescriben (14)_{1,2} en la formulación presión-saturación; para lograrlo definimos la presión global, de acuerdo con Antoncev (1972) y Chavent y Jaffré (1986), mediante la relación,

$$p = \frac{1}{2}(p_w + p_a) + \frac{1}{2} \int_{S_c}^S \frac{\lambda_a - \lambda_w}{\lambda} \frac{dp_c}{d\xi} d\xi = p_a - \int_0^{p_c(S)} f_w(\mathbf{x}, p_c^{-1}(\xi)) d\xi, \quad (21)$$

con el empleo de las ecuaciones (15)-(19); recordando que $S = S_w$, y S_c es tal que $p_c(S_c) = 0$, en el Apéndice se da una deducción de la anterior relación. En este nivel se introduce la velocidad total ponderada mediante la relación,

$$\mathbf{u} = \rho_w \mathbf{u}_w + \rho_a \mathbf{u}_a. \quad (22)$$

Por lo que de (15)-(19) y (21), las ecuaciones (14) se transforman en las siguientes relaciones,

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi(\rho_w S_w + \rho_a S_a)) + \text{div } \mathbf{u} &= \rho_w q_w + \rho_a q_a \\ \mathbf{u} &= -k\lambda (\omega(p, S) \nabla p - \mathbf{G}_\lambda) \end{aligned} \right\} (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \quad (23)$$

que se conoce como la relación para la presión, y

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_w S_w) + \text{div} (f_w \mathbf{u} + k\lambda f_w f_a \mathbf{g}(\rho_w - \rho_a)) \\ + \text{div} (k\lambda f_w f_a \nabla p_c) = \rho_w q_w, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T). \end{aligned} \quad (24)$$

Conocida como la ecuación para la saturación. En donde,

$$\begin{cases} \omega(p, S) = 1 + \int_0^{p_c(S)} \frac{\partial}{\partial p} f_w(p, p_c^{-1}(\xi)) d\xi \\ \mathbf{G}_\lambda = (f_w \rho_w + f_a \rho_a) \mathbf{g} \end{cases} \quad (25)$$

En el Apéndice se presenta la deducción de las anteriores ecuaciones. Las ecuaciones (23) y (24) conforman las relaciones para la presión y saturación, respectivamente. Puede demostrarse, ver el Apéndice, que las velocidades de fase se relacionan con la velocidad total mediante,

$$\begin{cases} \mathbf{u}_w = \rho_w^{-1} (f_w \mathbf{u} + k \lambda f_w f_a (\nabla p_c + \mathbf{g}(\rho_w - \rho_a))) \\ \mathbf{u}_a = \rho_a^{-1} (f_a \mathbf{u} - k \lambda f_w f_a (\nabla p_c + \mathbf{g}(\rho_w - \rho_a))) \end{cases} \quad (26)$$

Ahora debemos observar que la ecuación de la presión (23) tienen la misma forma que la (13) y (7)₂, respectivamente; mientras que la de saturación (24) tiene las mismas características que la ecuación de concentración (10), Chen y Ewing (1997). Por lo que los procedimientos mixtos pueden ser empleados para resolver \mathbf{u} y p simultáneamente; por su parte, la ecuación (24) puede ser resuelta mediante procedimientos apropiados a problemas advectivo dominantes. Lo anterior constituye el núcleo de nuestra estrategia de aproximación al problema de flujo bifásico como la descomposición de dos subproblemas: de flujo y transporte de una sola fase en medios porosos, fracturados o combinación de ambos. En la siguiente sección se discute la estrategia de aproximación empleada en este proyecto al problema de flujo bifásico.

No terminaremos los comentarios sin antes observar que la presión global p tiene la siguiente explicación física. De (16) y (21) se sigue que (Apéndice),

$$\lambda \omega(p, S) \nabla p = \lambda_w \nabla p_w + \lambda_a \nabla p_a.$$

Lo que implica que la presión global, es la presión que debe producir el flujo de un fluido con movilidad $\lambda \omega$, igual a la suma de los flujos de dos fluidos w y a .

6.2.3 Formulación con velocidad total no ponderada

La ecuación de flujo total ponderado (22) se comporta más suavemente (Chen y Ewing, 1997 y Chen et al., 1994), que cuando se define a la velocidad total sin pesarla por la densidad; si en lugar de definir la velocidad total ponderada como en (22), la definimos simplemente como la velocidad total,

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_w + \mathbf{u}_a, \quad (27)$$

debido a la ponderación por la densidad en la relación (22), la velocidad \mathbf{u} se comporta más suavemente que en (27). De la nueva definición para la velocidad (27) es posible derivar un conjunto de ecuaciones similares para la formulación presión-saturación, Chen et al. (1994). Si en la deducción de (21), ver el Apéndice, se substituye el flujo fraccional f_w en función de f_a ; es decir $f_w = 1 - f_a$, se obtiene la siguiente expresión equivalente de la presión global,

$$p = p_w + \int_0^{p_c(S)} f_a(\mathbf{x}, p_c^{-1}(\xi)) d\xi. \quad (28)$$

Por lo que la velocidad total se expresa por,

$$\begin{cases} \mathbf{u} = -k\lambda(\nabla p - \mathbf{G}_\lambda) \\ \text{con,} \quad \mathbf{G}_\lambda = (f_w \rho_w + f_a \rho_a) \mathbf{g} \end{cases} \quad (29)$$

que son similares a (23)₂ y (25)₂, respectivamente. Las correspondientes velocidades de fase están dadas por,

$$\begin{cases} \mathbf{u}_w = f_w \mathbf{u} + k\lambda_a f_w (\nabla p_c + \mathbf{g}(\rho_w - \rho_a)) \\ \mathbf{u}_a = f_a \mathbf{u} - k\lambda_w f_a (\nabla p_c + \mathbf{g}(\rho_w - \rho_a)) \end{cases} \quad (30)$$

que son equivalentes a las ecuaciones (26)_{1,2}, respectivamente. La deducción de (28)-(30) es similar a sus correspondientes, ya establecidas en el Apéndice. Finalmente, sumando (14)₁ con $\alpha = w, a$ se obtiene la relación de la presión; así como también, substituyendo (30)₁ en (14)₁ con $\alpha = w$, se obtiene la ecuación para la saturación, respectivamente,

$$\begin{cases} \text{div } \mathbf{u} = -\frac{\partial \phi}{\partial t} - \sum_{\alpha=w}^a \frac{1}{\rho_\alpha} \left(\phi S_\alpha \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla \rho_\alpha - \rho_\alpha q_\alpha \right) \\ \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \text{div} (f_w \mathbf{u} + k\lambda_a f_w (\nabla p_c + \mathbf{g}(\rho_w - \rho_a))) \\ \quad = -S_w \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{1}{\rho_w} \left(\phi S_w \frac{\partial \rho_w}{\partial t} + \mathbf{u}_w \cdot \nabla \rho_w - \rho_w q_w \right) \end{cases} \quad (31)$$

Nuevamente en esta formulación, las condiciones inicial y de frontera para las relaciones de presión-saturación (29) y (31) son de los tres tipos principales, Arbogast (1992) y Chavent y Jaffré (1986). Sea $\partial\Omega$ la frontera de Ω , la unión de los conjuntos disjuntos: $\Gamma_{p,i} = \Gamma_i$, $i = 1, 2, 3$; $\Gamma_{s,2} = \Gamma_2$ y $\Gamma_{s,1} = \Gamma_1 \cup \Gamma_3$. Entonces, tomando $\alpha = w, a$ y $S = S_w$, se tiene.

en (22), Chen y Ewing (1997 y 1998) y Chen et al. (1994). La relación para la presión (23) se puede resolver mediante métodos mixtos de elemento finito, los cuales permiten determinar la presión y velocidad de manera simultánea, Ewing (1995); por su parte la ecuación para la saturación (24) puede ser aproximada mediante métodos apropiados de problemas advectivo dominantes, lo que conforma el fundamento de este trabajo. Desde la perspectiva del flujo fraccional, las anteriores observaciones permiten conformar el núcleo de la discusión de nuestro trabajo subsecuente, que se puede resumir de la siguiente manera: *es posible descomponer el análisis del flujo bifásico mediante el análisis de los problemas en velocidad y presión de una fase y el transporte de solutos en sistemas acuíferos.*

En este nivel de la discusión es necesario mencionar que los conceptos de la física relacionada con el flujo miscible e inmiscible hasta aquí vertidos, son el producto de los diferentes autores citados hasta el momento. En particular, hemos llegado a describir la estructura básica del flujo fraccional que permita analizar el flujo simultáneo de dos fases en acuíferos. Se ha concluido que es posible descomponer el estudio del flujo simultáneo de dos fases mediante el análisis del flujo en velocidad y presión de una sola fase y el de transporte de solutos en acuíferos. De acuerdo con el objetivo del proyecto que se presenta (establecido en el Capítulo I), nuestro eje de trabajo solamente consiste en proponer nuevas técnicas de solución numérica para la descomposición concluida desde la perspectiva del flujo fraccional. En consecuencia con lo anterior, en el siguiente capítulo se propondrán las dos nuevas metodologías desarrolladas, para abordar los problemas de flujo (Alduncin y Vera, 2003) y, con más énfasis el de transporte (Martínez Nájera, 2002) en una fase, basadas en conceptos de análisis convexo, subdiferenciales, resolventes y algoritmos iterativos de Uzawa, formulaciones variacionales de los problemas mencionados y aproximaciones internas de elemento finito. En el siguiente capítulo se describen los conceptos matemáticos sobre los que se basa la solución de los problemas descritos.

Capítulo III

Subdiferenciales y resolventes. Problemas en velocidad, presión y de transporte

8 Introducción

Los problemas de valores inicial y a la frontera con restricciones locales pueden ser formulados de manera natural, en términos de ecuaciones subdiferenciales; la caracterización mediante subdiferenciales y la dualización de las mismas, permite obtener de manera directa y sistemática las formulaciones variacionales de las ecuaciones de balance (de masa y energía), condiciones de frontera y restricciones (en el interior o sobre la frontera) de diversos fenómenos físicos. Las formulaciones variacionales permiten realizar el análisis matemático asociado, así como el desarrollo de estrategias de aproximación de soluciones mediante esquemas numéricos de elemento finito y diferencias finitas (Ciarlet, 1976; Glowinski et al., 1981; Glowinski, 1984 y Alduncin, 1989).

El procedimiento general puede ser descrito de la siguiente forma: dado un problema no necesariamente potencial de valores inicial y a la frontera, de condiciones y restricciones interior y de frontera convexas; primeramente se deben expresar en términos de ecuaciones subdiferenciales, con lo que se establece la formulación variacional primal local. Luego debe efectuarse la dualización de las condiciones y restricciones vía las gráficas inversas, con lo que se obtiene la formulación variacional local dual del problema. De la combinación de las ecuaciones subdiferenciales primal y dual es posible establecer esquemas mixtos; una vez explicitadas las formas primal, dual y mixtas se procede a la construcción de las correspondientes formulaciones variacionales globales, las cuales son susceptibles de ser implementadas mediante procedimientos de solución numérica de elemento y diferencias finitas. Las formulaciones variacionales de las ecuaciones de balance, condiciones y restricciones de los diversos fenómenos físicos, permiten tanto su propio análisis matemático de existencia y unicidad, así como también el desarrollo de métodos eficaces de solución numérica.

Las formas subdiferenciales son expresadas como desigualdades variacionales locales, con las que, mediante integración formal y la aplicación del teorema de la divergencia y localización (Gurtin, 1981), en las ecuaciones de balance de campo, se obtienen las formulaciones variacionales globales. Las condiciones y restricciones interior y de frontera de un fenómeno físico pueden ser expresadas en términos de subdiferenciales de funcionales convexas, Alduncin (1989). La importancia del procedimiento radica en que las relaciones subdiferenciales precisamente corresponden con la formulación variacional local del problema.

En el análisis y construcción de procedimientos eficaces de solución numérica del fenómeno de flujo y transporte miscible subterráneo, las formulaciones mixtas han demostrado ser las apropiadas para cuando se trata de encontrar aproximaciones exactas para el campo de velocidad, simultáneamente a las del campo de presión. Debido a los efectos de las grandes escalas y heterogeneidad involucradas en acuíferos, generalmente es muy conveniente descomponer al sistema, en subsistemas sincronizados interactuantes, mediante interfaces que transmiten las condiciones de continuidad, tanto de presión como de flujos de masa. Las formulaciones variacionales mixtas macro-híbridas forman la base para el análisis y solución numérica de aproximaciones de elemento y diferencias finitas del fenómeno de flujo en acuíferos. De igual manera en este trabajo, el tratamiento del fenómeno de transporte advectivo dominante, también se realiza dentro del contexto de subdiferenciales; donde el primer paso de la metodología consiste en establecer las correspondientes formulaciones variacionales locales, para luego proceder a establecer las formulaciones globales o débiles, las cuales pueden ser descritas numéricamente mediante elemento y diferencias finitas. Con la finalidad de lograr aproximaciones más exactas para cuando el término advectivo es dominante, a este se le aplica upwind parcial de tipo Ikeda (Ikeda, 1983).

Se comentan conceptos de análisis convexo y de subdiferenciales necesarios para el desarrollo del marco básico que sirve de sustento para el subsecuente desarrollo de las metodologías de solución que se proponen en este proyecto. También se discuten conceptos necesarios de resolventes, a partir de los cuales se proponen procedimientos de solución de punto fijo de las desigualdades que resultan después de aplicar formulaciones variacionales vía subdiferenciales.

Para el planteamiento del procedimiento de solución numérica del problema en velocidad y presión, primeramente se establece la ecuación de balance flujo monofásico por resolver, en velocidad y presión, junto con sus condiciones generales de frontera de tipo Dirichlet y Neumann. Luego se indican los conceptos de la descomposición de dominio de la región de interés, Ω , para los fines de la modelación matemática, lo que conduce al planteamiento de E subproblemas acoplados mediante condiciones de transmisión en las interfaces. Se continúa con el establecimiento de la formulación variacional, desde la perspectiva de subdiferenciales, de los E problemas acoplados junto con sus condiciones de sincronía. Luego, a partir de la formulación variacional del balance flujo, se propone la aproximación de elemento finito en multidominio; lo que permite determinar el problema mixto macrohíbrido (**MHM**) en términos de subespacios locales de elemento finito. Enseguida se procede a establecer los algoritmos desarrollados, de punto próximo, para resolver el sistema en desigualdades resultante de los E problemas acoplados, Alduncin y Vera (2003).

Respecto al problema de transporte miscible, que conforma el fundamento de este trabajo, se establecen los aspectos heurísticos y constructivos para el diseño de modelos de manejo miscible en sistemas acuíferos. El modelo completo se compone por los algoritmos primal y mixto de control interno dualizado. En la ecuación de transporte se consideran términos cinemáticos, al tomar en cuenta las componentes de advección y difusión molecular, mecánica e hidrodinámica; pero también se incluyen términos de absorción cinética irreversible de primer orden del soluto con el sistema suelo-agua, así como los de fuente/sumidero para la concentración. Debido al carácter hiperbólico-parabólico de la ecuación de transporte, cuando el término advectivo domina sobre el de difusión, en este proyecto se le aproxima mediante la técnica de upwind parcial de Ikeda (Ikeda,1983); la cualidad anterior permite obtener un modelo robusto ante situaciones advectivo dominantes, Martínez Nájera (2002).

Los nuevos esquemas que se proponen, para la resolución de los problemas en una sola fase en velocidad-presión (Alduncin y Vera, 2003) y transporte (Martínez Nájera, 2002) de solutos en sistemas acuíferos, completan la metodología de solución establecida en el objetivo de este proyecto de investigación, indicado en el primer capítulo.

9 Conceptos de análisis convexo

Los problemas de valores inicial y a la frontera con restricciones, pueden ser formulados en términos de ecuaciones subdiferenciales de funcionales convexas; la importancia de este concepto radica en que las ecuaciones subdiferenciales corresponden precisamente con la formulación variacional del problema, a partir de la cual es posible obtener formulaciones variacionales locales alternativas y globales, que luego pueden ser implementadas numéricamente mediante esquemas de elemento y diferencias finitas. Se comentan conceptos y definiciones de análisis convexo, subdiferenciales y resolventes que luego se requerirán para presentar un planteamiento general de solución de los problemas en velocidad y presión y advectivo dominantes. La noción fundamental del esquema de trabajo es el de subdiferenciales, para introducir el concepto se tienen las siguientes consideraciones.

Se dice que la función $\phi : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ es convexa si satisface la siguiente relación,

$$\phi(\theta\eta + (1 - \theta)\xi) \leq \theta\phi(\eta) + (1 - \theta)\phi(\xi), \quad \forall \theta \in (0, 1), \quad \forall \eta, \xi \in \mathfrak{R}. \quad (33)$$

El dominio efectivo de ϕ se denota por el subconjunto,

$$\mathcal{D}(\phi) = \{\xi \in \mathfrak{R} : \phi(\xi) < +\infty\} \subset \mathfrak{R}, \quad (34)$$

el cual supondremos que es no vacío y cerrado, en cuyo caso ϕ se dice que es propia. Se dice que una función convexa ϕ es semicontinua inferiormente si para toda sucesión $\{\xi_n\}_{n \geq 1}$ convergente a ξ se tiene que,

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \phi(\xi_n) \geq \phi(\xi). \quad (35)$$

La función convexa ϕ , no necesariamente diferenciable, es subdiferenciable en el punto $\eta \in \mathcal{D}(\phi) \subset \mathfrak{R}$ si existe un real $\eta^* \in \mathfrak{R}$ llamado subgradiente, tal que,

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

es decir si la gráfica de la función $\xi \mapsto \phi(\eta) + \eta^* \{\xi - \eta\}$, de pendiente η^* y que pasa por $\phi(\eta)$, siempre esta debajo o sobre la gráfica de ϕ para todo $\xi \in \mathcal{D}(\phi)$. El conjunto de pendientes η^* de ϕ en η , define el subdiferencial de ϕ en η , el cual se denota por $\partial\phi(\eta)$; de la relación anterior, $\partial\phi(\eta)$ se caracteriza de la siguiente manera,

$$\partial\phi(\eta) = \{\eta^* \in \mathfrak{R} : \phi(\xi) \geq \phi(\eta) + \eta^* \{\xi - \eta\}, \quad \forall \xi \in \mathcal{D}(\phi)\}. \quad (36)$$

$\partial\phi(\eta)$ es monótona creciente y en general multivaluada, Brezis (1973) y Ekeland y Temam (1974), de \mathfrak{R} a la familia de subconjuntos de \mathfrak{R} , esto es $\partial\phi : \mathfrak{R} \rightarrow 2^{\mathfrak{R}}$.

Cuando ϕ no es subdiferenciable en η , entonces se tiene que $\partial\phi(\eta) = \emptyset$; este caso ocurre si y solo si $\eta \notin \mathcal{D}(\phi)$. La conexión entre diferenciabilidad y subdiferenciabilidad se da de la siguiente forma: ϕ es diferenciable en η si y solo si $\partial\phi(\eta) = \{\phi'(\eta)\}$, esto es si el subgradiente en η es único y es igual a la derivada de ϕ en η . La primitiva de la función $\partial\phi$, esto es ϕ , se le llama subpotencial. Para la construcción de los procedimientos duales y mixtos se requiere de la introducción del concepto funciones polares. La conjugada o polar $\phi^* : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ de la función convexa ϕ propia, se define de la siguiente manera,

$$\phi^*(\xi^*) = \sup_{\xi \in \mathfrak{R}} \{\xi^* \xi - \phi(\xi)\}, \quad (37)$$

la cual es una función convexa, con dominio efectivo $\mathcal{D}(\phi^*) \subset \mathfrak{R}$ no vacío y cerrado. En forma similar a la relación (36), el subdiferencial de ϕ^* en η^* está definido por el subconjunto,

$$\partial\phi^*(\eta^*) = \{\eta \in \mathfrak{R} : \phi^*(\xi^*) \geq \phi^*(\eta^*) + \eta \{\xi^* - \eta^*\}, \quad \forall \xi^* \in \mathcal{D}(\phi^*)\} \quad (38)$$

El siguiente lema relaciona el dominio efectivo y el subdiferencial de una funcional convexa, con el dominio efectivo y subdiferencial de su polar; el lema juega un papel de primordial importancia en los desarrollos subsecuentes; en el concepto de dualización del problema advectivo dominante y la caracterización de las condiciones de transmisión en el problema en velocidad y presión.

Lema 1. *Sea $\phi : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ una función convexa, con dominio efectivo $\mathcal{D}(\phi) \neq \emptyset$ y cerrado. Entonces,*

$$\eta \in \mathcal{D}(\phi) \quad : \quad \eta^* \in \partial\phi(\eta) \quad \Leftrightarrow \quad \eta^* \in \mathcal{D}(\phi^*) \quad : \quad \eta \in \partial\phi^*(\eta^*) \quad (39)$$

donde $\phi^* : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ es la conjugada o polar de ϕ .

Esto es, la gráfica inversa del subdiferencial de ϕ , $\partial\phi$, es la gráfica del subdiferencial de ϕ^* , $\partial\phi^*$. Una demostración del lema se encuentra en Ekeland y Temam (1974). \square

De lema anterior se concluye que una ecuación subdiferencial primal se caracteriza por su ecuación subdiferencial dual; de la expresión para el subdiferencial dada en (36) y (38), así como del lema anterior (39), se tiene la siguiente interpretación,

$$\begin{cases} \eta \in \mathcal{D}(\phi) & : & \phi(\xi) - \phi(\eta) \geq \eta^* \{\xi - \eta\}, & \forall \xi \in \mathcal{D}(\phi) & \Leftrightarrow \\ \eta^* \in \mathcal{D}(\phi^*) & : & \phi^*(\xi^*) - \phi^*(\eta^*) \geq \eta \{\xi^* - \eta^*\}, & \forall \xi^* \in \mathcal{D}(\phi^*) \end{cases} \quad (40)$$

Las cuales son desigualdades variacionales correspondientes, en términos de ϕ y ϕ^* .

Considerando las ecuaciones de balance de campo para los fenómenos de flujo en velocidad-presión y de transporte, parece natural suponer que el modelo que resuelva los problemas asociados de valores inicial y a la frontera consiste primeramente en caracterizar las restricciones interior y de frontera mediante los dominios efectivos de funcionales convexas, propias y semicontinuas inferiormente correspondientes,

$$\begin{cases} \phi(\xi, t; \cdot) : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}, & \text{para en interior} \\ \psi(\xi, t; \cdot) : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}, & \text{para la frontera} \end{cases} \quad (41)$$

tales que las condiciones en el interior y sobre la frontera estén, respectivamente, en el subdiferencial de dichas funcionales convexas (Martínez Nájera, 1992 y 2002). O bien, alternativamente (Alduncin, 1986), caracterizar las condiciones en el interior y sobre la frontera en términos de subdiferenciales de funcionales convexas, tales que los dominios efectivos de estas definan las restricciones correspondientes.

Finalmente y para concluir esta sección, si \mathbf{K} está en \mathfrak{R}^n es un subconjunto convexo y cerrado, se define la funcional indicatriz de \mathbf{K} por,

$$I_{\mathbf{K}} = \begin{cases} 0, & \text{si } \mathbf{x} \in \mathbf{K} \\ +\infty, & \text{si } \mathbf{x} \notin \mathbf{K} \end{cases} \quad (42)$$

En las siguientes secciones se aplican los anteriores conceptos y resultados en la construcción de las formulaciones variacionales de problemas de valores inicial y a la frontera con restricciones y condiciones convexas en el interior y a la frontera.

10 Formulación subdiferencial local y global de problemas de valores a la frontera

Se comenta la forma en que los problemas de valores inicial y a la frontera pueden ser manejados desde la perspectiva del análisis convexo y subdiferenciales (Duvaut y Lions, 1972 y Alduncin, 1989); también se hace referencia a los aspectos suficientes para la existencia y unicidad de la solución de las formulaciones que resultan de la aplicación de dichos enfoques. Los problemas de valores a la frontera definidos sobre $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega \subset \mathfrak{R}^n$, $n \geq 1$, pueden ser expresados en términos de relaciones subdiferenciales locales de la siguiente manera (relaciones (41) y Lema 1),

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

Donde \mathcal{P} es el operador formal elíptico; γ y $\partial/\partial\nu$ denotan los operadores de frontera Dirichlet y Neumann, respectivamente; f es el término de fuente interior; $\partial\phi(\mathbf{x}; \cdot) : \mathfrak{R}^l \rightarrow 2^{\mathfrak{R}^l}$ y $\partial\psi(\mathbf{x}; \cdot) : \mathfrak{R}^m \rightarrow 2^{\mathfrak{R}^m}$, $l, m \geq 1$ son los subdiferenciales locales que modelan las condiciones y restricciones interior y a la frontera, respectivamente, del problema de valores a la frontera. La hipótesis fundamental consiste en suponer que para cada $\mathbf{x} \in \Omega$ y cada $\mathbf{x} \in \partial\Omega$, los correspondientes subpotenciales $\phi(\mathbf{x}; \cdot) : \mathfrak{R}^l \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ y $\psi(\mathbf{x}; \cdot) : \mathfrak{R}^m \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ son funcionales convexas con dominios efectivos $\mathcal{D}(\phi(\mathbf{x}; \cdot)) \subset \mathfrak{R}^l$ y $\mathcal{D}(\psi(\mathbf{x}; \cdot)) \subset \mathfrak{R}^m$ no vacíos y cerrados.

Al modelo (\mathcal{V}) se le denomina formulación variacional primal local o fuerte del problema; y en términos de la definición de subdiferencial dada en (36), Lema 1 y relaciones (40) se puede caracterizar de la siguiente manera,

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

También, mediante el uso del Lema 1 y las relaciones (40) es posible obtener, a partir de (\mathcal{V}') , las formulaciones variacionales duales y mixtas asociadas (Martínez Nájera, 1992). Multiplicando al operador \mathcal{P} por una variación v e integrando sobre Ω , usando el teorema de la divergencia, se obtiene la siguiente expresión,

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \mathcal{P}(u) \cdot v = a(u, v) - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial \nu}(u) \cdot \gamma v \\ u \in V_{\mathcal{P}} = \{v \in V(\Omega) : \mathcal{P}(u) \in L^2(\Omega)\}, \quad v \in V(\Omega) \end{array} \right. \quad (\mathbf{V}')$$

Donde $V(\Omega)$ es un espacio de Banach reflexivo, denso y continuamente embebido en $L^2(\Omega)$; y donde $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \Re$ es una funcional bilineal continua (Showalter, 1977 y Alduncin, 1983). Mediante la integración (\mathcal{V}') sobre los dominios respectivos y con el uso de (\mathbf{V}') es posible obtener la formulación variacional primal global o débil del problema de valores a la frontera,

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } f \in L^2(\Omega), \text{ encuentre } u \in K : \\ a(u, v - u) + \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}; v) - \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}; u) + \int_{\partial\Omega} \psi(\mathbf{x}; \gamma v) - \int_{\partial\Omega} \psi(\mathbf{x}; \gamma u) \geq \int_{\Omega} f \cdot \{v - u\}, \quad \forall v \in K \end{array} \right. \\ \\ \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } f \in L^2(\Omega), \text{ encuentre } u \in K : \\ a(u, v - u) + j(v) - j(u) \geq \langle f, v - u \rangle_V, \quad \forall v \in K \\ K = \{v \in V(\Omega) : \phi(\cdot; v) \in L^1(\Omega), \psi(\cdot; \gamma v) \in L^1(\partial\Omega)\} \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (\mathbf{V})$$

Donde K denota el conjunto de campos admisibles primales. En Showalter (1977), Glowinski (1984) y Alduncin(1983 y 1987) se establecen las condiciones necesarias y suficientes para existencia y unicidad de la solución de la formulación variacional primal débil (\mathbf{V}) . La última expresión se obtiene mediante el uso de las siguientes definiciones,

$$\left. \begin{array}{l} \Phi(v) = \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}; v); \quad \Psi(\gamma v) = \int_{\partial\Omega} \psi(\mathbf{x}; \gamma v); \quad \langle f, v \rangle_V = \int_{\Omega} f \cdot v \\ j = \Phi + \Psi \circ \gamma : V \rightarrow \Re \cup \{+\infty\} \end{array} \right\}$$

En adelante y en lo que resta de la sección, para los fines de la demostración de la existencia y unicidad del problema **(V)**, se supondrá que la funcional j es convexa, propia y semicontinua inferiormente con dominio efectivo $\mathcal{D}(j) = \{v \in V : j(v) < +\infty\} = K$, y que K es un subconjunto convexo y cerrado de $V(\Omega)$. También se supondrá que $(V, \|\cdot\|_V, \langle \cdot, \cdot \rangle_V)$ es un espacio de Hilbert con dual topológico $(V^*, \|\cdot\|_{V^*})$ y par de dualidad denotado por $\langle \cdot, \cdot \rangle_V$; y que $(H, \|\cdot\|_H, \langle \cdot, \cdot \rangle_H)$ es otro espacio de Hilbert identificado con su dual; de modo de que V está densa y continuamente embebido en H , es decir: $V \hookrightarrow H \hookrightarrow V^*$. Una condición suficiente para la existencia y unicidad del problema **(V)** está dada por el siguiente,

Teorema 1. *Si la forma bilineal continua $a(\cdot, \cdot)$ es K -fuerte monótona, es decir,*

$$\exists \alpha > 0 : a(u - v, u - v) \geq \alpha \|u - v\|_V^2, \quad \forall u, v \in K,$$

*entonces el problema **(V)** tiene solución única.*

Demostración. Del teorema de representación de Riesz (Reddy, 1986), existen elementos β_u y v_f en el espacio de Hilbert V , tal que,

$$\left. \begin{aligned} a(u, v) &= \langle \beta_u, v \rangle_V, & u, v \in V \\ f(v) &= \langle v_f, v \rangle_V, & v \in V \end{aligned} \right\}$$

Donde $\beta \in \mathcal{L}(V, V^*)$. Por lo que para $\lambda > 0$, el problema **(V)** se puede reformular en términos del problema variacional de Euler-Lagrange de la siguiente manera,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } u \in K : \\ \langle \lambda v_f - \lambda \beta_u + u - u, v - u \rangle_V \leq \lambda j(v) - \lambda j(u), \quad \forall v \in K \end{array} \right. \quad (\text{T1})$$

En términos del mapeo proximidad relativo a λj , $Prox_{\lambda j} : V \rightarrow V$, (T1) está definido por,

$$\left\{ \begin{array}{l} w \mapsto \eta = Prox_{\lambda j}(w), \quad \text{es la solución en } K \text{ de,} \\ \langle w - \eta, v - \eta \rangle_V \leq \lambda j(v) - \lambda j(\eta), \quad \forall v \in K \end{array} \right. \quad (\text{T2})$$

En la siguiente sección se comentan detalles relacionados con esta formulación. La expresión anterior tiene la siguiente interpretación (Glowinski, 1984 y Alduncin, 1983, 1987 y 1989),

$$\begin{cases} \text{Encuentre } u \in K : \\ u = \text{Prox}_{\lambda_j}(\lambda v_f - \lambda \beta_u + u) \end{cases} \quad (\text{T3})$$

Por lo que la condición suficiente para la existencia y unicidad del problema (V) es que el operador,

$$F_\lambda : K \rightarrow K, \quad w \mapsto F_\lambda(w) = \text{Prox}_{\lambda_j}(\lambda v_f - \lambda \beta_w + w),$$

sea una contracción sobre el espacio métrico K para algún $\lambda > 0$. Ya que $\text{Prox}_{\lambda_j} : V \rightarrow V$ es no expansiva, también lo es F_λ ; consecuentemente, tiene un punto fijo en K único. \square

11 El concepto de resolventes y el problema mixto

En esta sección se presentan algoritmos de punto fijo, los cuales dan solución a los sistemas en desigualdades, que resultan de la aplicación de la formulación variacional vía subdiferenciales y procedimientos de elemento y diferencias finitas, a las ecuaciones de campo de flujo y transporte. Para los fines de sistematización en la derivación de los algoritmos se simplifica la forma de los problemas originales, para lo cual se plantea la siguiente formulación variacional mixto general.

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

Donde $(\mathbf{m})_1$ es la relación primal y $(\mathbf{m})_2$ la dual. Los algoritmos se derivan siguiendo un procedimiento Uzawa, el cual se describe a continuación. Multiplicando $(\mathbf{m})_2$ por $r > 0$ y sumando $\boldsymbol{\lambda}^*$, agrupando e invirtiendo de tiene lo siguiente,

$$\begin{cases} \text{multiplicando por } r > 0, & r \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha} \in r \partial \mathbf{G}^*(\boldsymbol{\lambda}^*) \\ \text{sumando } \boldsymbol{\lambda}^* \text{ y agrupando,} & \boldsymbol{\lambda}^* + r \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha} \in \boldsymbol{\lambda}^* + r \partial \mathbf{G}^*(\boldsymbol{\lambda}^*) = (\mathbf{I} + r \partial \mathbf{G}^*)(\boldsymbol{\lambda}^*) \\ \text{invirtiendo,} & (\mathbf{I} + r \partial \mathbf{G}^*)^{-1}(\boldsymbol{\lambda}^* + r \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}) \equiv \mathbf{J}_{\partial \mathbf{G}^*}^r(\boldsymbol{\lambda}^* + r \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}) \in \boldsymbol{\lambda}^* \end{cases} \quad (\mathbf{U})$$

El operador $\mathbf{J}_{\partial \mathbf{G}^*}^r$ es llamado el r -resolvente, o simplemente resolvente, del subdiferencial $\partial \mathbf{G}^*$, y está denotado por,

$$\mathbf{J}_{\partial \mathbf{G}^*}^r \equiv (\mathbf{I} + r \partial \mathbf{G}^*)^{-1}. \quad (43)$$

El resolvente $\mathbf{J}_{\partial\mathbf{G}^*}^r$ es una contracción firme univaluada (Alduncin, 1983 y 1997; Brezis, 1973 y Pazy, 1979); por lo que tiene la siguiente caracterización de punto fijo, Gabay (1982), ya especificada en $(\mathbf{U})_3$,

$$\boldsymbol{\lambda}^* = \mathbf{J}_{\partial\mathbf{G}^*}^r(\boldsymbol{\lambda}^* + r\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}). \quad (44)$$

Se tiene una caracterización importante del operador resolvente de un subdiferencial, el cual es de suma importancia para el cálculo o estimación numérica del mismo operador.

Lema 2. *Sea \mathbf{W} un espacio de Hilbert y sea $\phi : \mathbf{W} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ una funcional convexa, propia y semicontinua inferiormente. Entonces el operador resolvente del subdiferencial de ϕ , $\mathbf{J}_{\partial\phi}^r : \mathbf{W} \rightarrow \mathbf{W}$, está caracterizado por el mapeo de proximidad relativo a $r\phi$, $Prox_{r\phi} : \mathbf{W} \rightarrow \mathbf{W}$; es decir,*

$$\mathbf{J}_{\partial\phi}^r(w) = Prox_{r\phi}(w) \equiv \arg \left(\inf_{v \in \mathcal{D}(\phi)} \left\{ \frac{1}{2} \|v - w\|_{\mathbf{W}}^2 + r\phi(v) \right\} \right), \quad (45)$$

con $v, w \in \mathbf{W}$.

Demostración. Supongamos que $u \in \mathbf{W}$ satisface la relación $u = \mathbf{J}_{\partial\phi}^r(w)$; entonces de la definición de $\mathbf{J}_{\partial\phi}^r$ dada en (43), se tiene lo siguiente,

$$\left. \begin{aligned} u = \mathbf{J}_{\partial\phi}^r(w) &\equiv (\mathbf{I} + r\partial\phi)^{-1}(w) \Leftrightarrow w \in (\mathbf{I} + r\partial\phi)(u) = u + r\partial\phi(u) \\ &\Leftrightarrow 0 \in (u - w) + r\partial\phi(u) \Leftrightarrow 0 \in (u - w) + \partial(r\phi)(u) \end{aligned} \right\} \quad (L1)$$

Al final de la demostración se establece la equivalencia $(L1)_2$. Ahora bién, la suposición de que $u = \mathbf{J}_{\partial\phi}^r(w)$, junto con la última relación en $(L1)$ puede interpretarse en términos del mapeo de proximidad relativo a $r\phi$ mediante el siguiente problema variacional de Euler-Lagrange (T1 y T2 y Alduncin, 1983),

$$\left\{ \begin{aligned} w \mapsto u = \mathbf{J}_{\partial\phi}^r(w) = Prox_{r\phi}(w), &\text{ es la solución en } \mathcal{D}(\phi) \text{ de,} \\ \langle w - u, v - u \rangle_{\mathbf{W}} \leq r\phi(v) - r\phi(u), &\quad \forall v \in \mathcal{D}(\phi) \end{aligned} \right. \quad (L2)$$

Para demostrar la equivalencia entre $(L1)$ y $(L2)$, se tiene que de la última relación de $(L1)$ y de la definición de subdiferencial dada en (36) se concluye que,

$$\left\{ \begin{aligned} (w - u) &\in \partial(r\phi)(u) \\ \Leftrightarrow r\phi(v) &\geq r\phi(u) + (w - u) * \{v - u\} = r\phi(u) + \langle w - u, v - u \rangle_{\mathbf{W}}, \quad \forall v \in \mathcal{D}(\phi) \end{aligned} \right.$$

De donde se sigue (L2). Ahora, el problema variacional (L2) se corresponde con la minimización de la funcional Φ denotada por,

$$\Phi(v) = \frac{1}{2} \|v - w\|_{\mathbf{W}}^2 + r\phi(v), \quad \forall v \in \mathcal{D}(\phi). \quad (\text{L3})$$

Debido a siempre existe el gradiente, $u \mapsto \langle u - w, \cdot \rangle_{\mathbf{W}}$ de la funcional estrictamente convexa $u \mapsto \frac{1}{2} \|u - w\|_{\mathbf{W}}^2$, la solución del problema de minimización existe y es única y es llamada el punto próximo de w relativo a $r\phi$. Debe notarse que cuando $\phi = I_{\mathbf{K}}$ es la funcional indicatriz, relación (42), de un conjunto convexo, cerrado y no vacío $\mathcal{D}(\phi) \subset \mathbf{W}$, la solución resulta ser la proyección de w en $\mathcal{D}(\phi)$.

Para cerrar el argumento sólo resta por demostrar la equivalencia entre (L3) y (L2); así como la equivalencia en (L1)₂. Para demostrar la primera equivalencia, se tiene que la derivada direccional de Gâteaux \mathbf{D} de la funcional estrictamente convexa $\varphi(u) = \frac{1}{2} \|u - w\|_{\mathbf{W}}^2 = \frac{1}{2} \langle u - w, u - w \rangle_{\mathbf{W}}$ en la dirección s , Gurtin (1981), esta dada de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\varphi(u)[s] &= \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{\alpha} [\varphi(u + \alpha s) - \varphi(u)] \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\alpha} [\langle u + \alpha s - w, u + \alpha s - w \rangle_{\mathbf{W}} - \langle u - w, u - w \rangle_{\mathbf{W}}] \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\alpha} [\langle u - w, u - w \rangle_{\mathbf{W}} + 2\alpha \langle u - w, s \rangle_{\mathbf{W}} + \alpha^2 \langle s, s \rangle_{\mathbf{W}} - \langle u - w, u - w \rangle_{\mathbf{W}}] \\ &= \langle u - w, s \rangle_{\mathbf{W}}, \quad \alpha \in \mathfrak{R}; \quad u, w, s \in \mathbf{W}. \end{aligned} \quad (\text{L4})$$

Por lo que el mapeo $u \mapsto \langle u - w, \cdot \rangle_{\mathbf{W}} : \mathbf{W} \rightarrow \mathfrak{R}$ es el gradiente de la funcional continua y estrictamente convexa φ . Conociendo el gradiente de φ , podemos establecer el problema de minimización para Φ , (L3), de la siguiente manera,

$$\left. \begin{aligned} 0 \in \mathbf{D}\Phi(u)[\cdot] &= \langle u - w, \cdot \rangle_{\mathbf{W}} + \partial(r\phi)(u) \Leftrightarrow \langle w - u, \cdot \rangle_{\mathbf{W}} \in \partial(r\phi)(u) \\ &\Leftrightarrow r\phi(v) \geq r\phi(u) + \langle w - u, \cdot \rangle_{\mathbf{W}} [v - u], \quad \forall v \in \mathcal{D}(\phi) \\ &\Leftrightarrow r\phi(v) - r\phi(u) \geq \langle w - u, v - u \rangle_{\mathbf{W}}, \quad \forall v \in \mathcal{D}(\phi) \end{aligned} \right\} \quad (\text{L5})$$

Con lo que se demuestra la equivalencia entre (L3) y (L2), por lo que u es el punto próximo de w relativo a $r\phi$ y esta caracterizado por la ecuación (45).

Finalmente la equivalencia en (L1)₂, es decir la igualdad $r\partial\phi(u) = \partial(r\phi)(u)$, se obtiene a partir de la definición de subdiferencial dada en (36),

$$\begin{aligned}
\eta^* \in r\partial\phi(u) &\Leftrightarrow \frac{1}{r}\eta^* \in \partial\phi(u), \quad \text{ya que } r > 0 \\
&\Leftrightarrow \phi(v) \geq \phi(u) + \frac{1}{r}\eta^* \{v - u\}, \quad v \in \mathcal{D}(\phi) \\
&\Leftrightarrow r\phi(v) \geq r\phi(u) + \eta^* \{v - u\}, \quad v \in \mathcal{D}(\phi) \\
&\Leftrightarrow \eta^* \in \partial(r\phi)(u).
\end{aligned} \tag{L6}$$

Con lo que se concluye la demostración del Lema 2. \square

De igual manera se tiene una importante relación entre el mapeo de proximidad relativo a $r\phi$ y su contraparte polar; esencialmente dicha relación guarda su conexión a través del Lema 1.

Lema 3. *Bajo la notación del lema anterior, sea $\phi^* : \mathbf{W} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ la conjugada o polar de la funcional ϕ . Entonces el operador de proximidad relativo a $r\phi^*$ está caracterizado de la siguiente manera.*

$$Prox_{r\phi^*} = \mathbf{I} - Prox_{r\phi \circ (1/r)\mathbf{I}} \tag{46}$$

Demostración. Del lema anterior $Prox_{r\phi^*} = \mathbf{J}_{\partial\phi^*}^r$, entonces sea $u = Prox_{r\phi^*}(w) = \mathbf{J}_{\partial\phi^*}^r(w)$, por lo que,

$$\left. \begin{aligned}
u = \mathbf{J}_{\partial\phi^*}^r(w) &\equiv (\mathbf{I} + r\partial\phi^*)^{-1}(w) \Leftrightarrow u = (\mathbf{I} + \partial(r\phi^*))^{-1}(w) \\
&\Leftrightarrow w \in u + \partial(r\phi^*)(u) \Leftrightarrow w - u \in \partial(r\phi^*)(u) \\
&\Leftrightarrow u \in \partial(r\phi^*)^*(w - u), \quad \text{por dualización de } \partial(r\phi^*), \text{ Lema 1} \\
&\Leftrightarrow u + (w - u) \in \partial(r\phi^*)^*(w - u), \quad \text{sumando y restando } w \\
&\Leftrightarrow w \in (w - u) + \partial(r\phi^*)^*(w - u) \\
&\Leftrightarrow w \in (\mathbf{I} + \partial(r\phi^*)^*)(w - u) \Leftrightarrow (w - u) = (\mathbf{I} + \partial(r\phi^*)^*)^{-1}(w) \\
&\Leftrightarrow u = w - (\mathbf{I} + \partial(r\phi^*)^*)^{-1}(w) \Leftrightarrow u = \left(\mathbf{I} - (\mathbf{I} + \partial(r\phi^*)^*)^{-1}\right)(w)
\end{aligned} \right\} \tag{L7}$$

De la definición de la polar de ϕ , ϕ^* , dada en (37) se tiene que,

$$\begin{aligned}
(r\phi^*)^*(\xi^*) &= \sup_{\xi \in \mathbf{W}} \{(\xi^*, \xi)_{\mathbf{W}} - r\phi^*(\xi)\} = \sup_{\xi \in \mathbf{W}} \left\{ r \left[\frac{1}{r}(\xi^*, \xi)_{\mathbf{W}} - \phi^*(\xi) \right] \right\} \\
&= \sup_{\xi \in \mathbf{W}} \left\{ r \left[\left(\frac{1}{r}\xi^*, \xi \right)_{\mathbf{W}} - \phi^*(\xi) \right] \right\} = r \sup_{\xi \in \mathbf{W}} \left\{ \left(\frac{1}{r}\xi^*, \xi \right)_{\mathbf{W}} - \phi^*(\xi) \right\} \\
&= r(\phi^*)^* \left(\frac{1}{r}\xi^* \right) = r\phi \left(\frac{1}{r}\xi^* \right) = r\phi \left(\frac{1}{r}\mathbf{I}\xi^* \right) = r\phi \left(\frac{1}{r}\mathbf{I} \right) (\xi^*) = r \left(\phi \circ \frac{1}{r}\mathbf{I} \right) (\xi^*).
\end{aligned} \tag{L8}$$

Por lo que combinando los resultados obtenidos en (L7) y (L8), se concluye lo siguiente,

$$\left. \begin{aligned}
u &= \left(\mathbf{I} - \left(\mathbf{I} + \partial(r\phi^*)^* \right)^{-1} \right) (w) \Leftrightarrow u = \left(\mathbf{I} - \left(\mathbf{I} + \partial \left(r\phi \circ \frac{1}{r} \mathbf{I} \right) \right)^{-1} \right) (w) \\
&\Leftrightarrow u = \left(\mathbf{I} - \left(\mathbf{I} + r\partial \left(\phi \circ \frac{1}{r} \mathbf{I} \right) \right)^{-1} \right) (w) \Leftrightarrow u = \left(\mathbf{I} - \mathbf{J}_{\partial(\phi \circ \frac{1}{r} \mathbf{I})}^r \right) (w) \\
&\Leftrightarrow u = \text{Prox}_{r\phi^*}(w) = \left(\mathbf{I} - \text{Prox}_{r\phi \circ \frac{1}{r} \mathbf{I}} \right) (w)
\end{aligned} \right\} \quad (\text{L9})$$

con lo que el Lema 3 queda demostrado. \square

Los conceptos y lemas discutidos serán de gran utilidad las siguientes secciones donde se aborda el análisis de la solución numérica de los problemas en velocidad y presión, así como de transporte advectivo dominante.

12 El problema de flujo en velocidad y presión

La metodología que se corresponde con un sistema en velocidad y presión, la cual permite construir aproximaciones exactas para los campos de velocidad y presión de manera simultánea en subdominios de subsistemas interactuantes, los cuales mantienen geometrías y parámetros simples, Alduncin y Vera (2003). Para lograr el anterior objetivo se considera un acuífero que ocupa la región del espacio $\Omega \subset \mathfrak{R}^3$, con frontera regular denotada por $\partial\Omega \subset \mathfrak{R}^2$; en el cual se analiza el flujo de una sola fase durante un intervalo de tiempo $(0, T)$. El flujo monofásico esta caracterizado en términos de la velocidad \mathbf{u} y la presión p macroscópicas en el acuífero. De acuerdo con Bear (1972), Freeze y Cherry (1979) y Fetter (1993), y para los fines de simplificación se suponen las siguientes hipótesis de trabajo: i) el flujo se da bajo condiciones isotérmicas; ii) el flujo es totalmente saturado por una sola fase líquida; iii) la fase líquida es incompresible; y iv) la matriz sólida no sufre deformación (no se consolida). Por lo que las ecuaciones de campo están dadas por la relación de Darcy y el balance de masa para la fase líquida.

$$\left. \begin{aligned}
\mathbf{K}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{u}(\mathbf{x}) &= -\mathbf{grad} p(\mathbf{x}) + \rho(\mathbf{x})\mathbf{g} \\
\text{div} \mathbf{u}(\mathbf{x}) &= \hat{q}(\mathbf{x})
\end{aligned} \right\} \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (47)$$

En donde \mathbf{u} y p denotan los campos de descarga específica o velocidad de Darcy y presión, respectivamente. El campo ρ denota la densidad de la fase líquida; \mathbf{g} es el vector de la constante gravitacional. \mathbf{K} es el tensor simétrico de conductividad hidráulica; mientras que \hat{q} indica la razón volumétrica de flujo (fuente/sumidero) de la fase líquida. En el caso de flujo bifásico las anteriores ecuaciones están acopladas con las ecuaciones de transporte para la concentración o saturación, las cuales son de tipo hiperbólico-parabólico (Ewing, 1983; Chen y Ewing, 1997; Helmig, 1997 y Martínez Nájera, 2002).

Con respecto a las condiciones generales de frontera para (47), se tiene lo siguiente: sobre la porción de la frontera $\partial\Omega_N$ se prescribe una condición de Neumann igual a la velocidad normal \hat{u}_n ; mientras que en

la porción de frontera abierta complementaria $\partial\Omega_D (= \partial\Omega \setminus \overline{\partial\Omega_N})$ se establece una condición de tipo Dirichlet igual a la presión \widehat{p} ,

$$\begin{cases} \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \widehat{u}_n(\mathbf{x}), & \text{para } \mathbf{x} \in \partial\Omega_N, \\ p(\mathbf{x}) = \widehat{p}(\mathbf{x}), & \text{para } \mathbf{x} \in \partial\Omega_D \end{cases} \quad (48)$$

En el caso de condición de frontera de Neumann pura, $\partial\Omega_D = \emptyset$, se supone que la condición de compatibilidad,

$$\int_{\partial\Omega} \widehat{u}_n \, d\partial\Omega = \int_{\Omega} \widehat{q} \, d\Omega,$$

se satisface localmente para que se satisfaga el principio de conservación de masa. La relación anterior se obtiene del teorema de la divergencia en la ecuación (47)₂ y la condición de Neumann (48)₁.

Para formular el problema como un sistema macro-híbrido, primeramente se introduce una descomposición disjunta del dominio o región ocupada por el acuífero o yacimiento, que ocupa una región Ω de \mathfrak{R}^3 . Al dominio Ω se le descompone como la unión disjunta de subdominios que delimitan los subsistemas que componen al medio poroso o fracturado, los cuales interactúan mecánicamente entre sí.

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{e=1}^E \overline{\Omega}_e, \quad \Omega_e \cap \Omega_f = \emptyset, \quad 1 \leq e < f \leq E. \quad (49)$$

Donde E es el número de subdominios $\overline{\Omega}_e$ de la partición de $\overline{\Omega}$, los cuales no se traslapan dos a dos, e interactúan mecánicamente entre sí a través de sus fronteras. Los subdominios $\overline{\Omega}_e$ mantienen las siguientes fronteras internas (Γ_e) e interfaces (Γ_{ef}), las cuales suponemos suaves por tramos,

$$\left. \begin{aligned} \Gamma_e &= \partial\Omega_e \cap \Omega, & 1 \leq e \leq E \\ \Gamma_{ef} &= \Gamma_e \cap \Gamma_f, & 1 \leq e < f \leq E \end{aligned} \right\} \quad (50)$$

Por lo que el problema de valores a la frontera (47)-(??) sobre la región Ω , se transforma en un conjunto de E subproblemas locales en cada uno de los subdominios $\overline{\Omega}_e$ para $e = 1, \dots, E$.

$$\left\{ \begin{aligned} \mathbf{K}_e^{-1} \mathbf{u}_e &= -\mathbf{grad} \, p_e + \rho_e \mathbf{g}, \\ \operatorname{div} \mathbf{u}_e &= \widehat{q}_e, \\ \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e &= \widehat{u}_{ne}, & \mathbf{x} \in \partial\Omega_{Ne} \\ p_e &= \widehat{p}_e, & \mathbf{x} \in \partial\Omega_{De} \end{aligned} \right\} \quad \mathbf{x} \in \Omega_e \quad (P_e)$$

intercomunicados de acuerdo con las siguientes condiciones de transmisión en la interfaces, para asegurar la continuidad del flujo y presión,

$$\left. \begin{aligned} +\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e &= -\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f \\ p_e &= p_f \end{aligned} \right\} \text{ en } \Gamma_{ef}, \quad 1 \leq e < f \leq E. \quad (51)$$

Donde el signo positivo en (51)₁ representa al flujo saliente del subdominio; mientras que el negativo indica el flujo entrante. este es el problema descompuesto mixto para el flujo, para el cual se establece su formulación variacional, así como su aproximación en elemento finito sobre mallas que no necesariamente coinciden sobre las interfaces de los subdominios, los cuales se resuelven mediante algoritmos de penalización-dualización de tipo Uzawa.

De acuerdo con las secciones 8 y 9, el primer paso en el proceso heurístico constructivo de la solución del problema de flujo, es caracterizar las condiciones y restricciones interior y a la frontera en términos de subdiferenciales de funcionales convexas, propias y semicontinuas inferiormente. La formulación variacional de la familia de problemas de flujo mixto locales $\{(P_e)\}_{e=1}^E$, de acuerdo con Alduncin (1989), se obtiene mediante: la integración y la aplicación del teorema de la divergencia en $(P_e)_1$; expresando las condiciones de frontera generalizadas $(P_e)_3$ y $(P_e)_4$; y la combinación formal de las correspondientes desigualdades. Considerando que los datos mantienen la siguiente regularidad: $\mathbf{K}_e^{-1} \in \mathbf{L}^\infty(\Omega_e)$, $\rho_e \in L^2(\Omega_e)$, $\hat{q}_e \in L^2(\Omega_e)$, $\hat{u}_{ne} \in L^2(\partial\Omega_{Ne})$ y $\hat{p}_e \in L^2(\partial\Omega_{De})$, para $e = 1, \dots, E$, se concluye el siguiente problema mixto macro-híbrido.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\mathbf{u}_e, p_e) \in \mathbf{K}_{\hat{u}_{ne}} \times Y(\Omega_e), \text{ para } e = 1, \dots, E : \\ \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e^{-1} \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega_e} \rho_e \mathbf{g}_e \cdot \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{De}} \hat{p}_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e \, d\partial\Omega \\ \quad + \int_{\Omega_e} p_e \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\Gamma_e} r_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e \, d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{0_{ne}} \\ \int_{\Omega_e} \operatorname{div} \mathbf{u}_e q \, d\Omega = \int_{\Omega_e} \hat{q}_e q \, d\Omega, \quad \forall q \in Y(\Omega_e) \\ \text{donde } \{r_e\} \in \mathbf{Q}_D \text{ satisface la condición de sincronización,} \\ 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e (s_e - r_e) \, d\Gamma, \quad \forall \{s_e\} \in \mathbf{Q}_D. \end{array} \right. \quad (\mathbf{MHM})$$

En el Apéndice se presenta una deducción de la anterior relación variacional (**MHM**).

En este caso el espacio $\mathbf{K}_{\hat{u}_{ne}}$ establece las condiciones de admisibilidad locales de tipo Neumann, las cuales se definen por,

$$\mathbf{K}_{\hat{u}_{ne}} = \{\mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega_e) : \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e = \hat{u}_{ne} \text{ en } \partial\Omega_{Ne}\}, \quad \text{para } e = 1, \dots, E. \quad (52)$$

Por su parte \mathbf{K}_{0,n_e} denota las condiciones de Neumann homogéneas $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e = 0$ en $\partial\Omega_{N_e}$. Debe de notarse que, ya que \mathbf{Q}_D es un subespacio, la anterior desigualdad variacional de sincronización corresponde a la igualdad variacional común de las formulaciones macro-híbridas dualizadas (Brezzi y Fortin, 1991).

$$\sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e s_e d\Gamma = 0, \quad \forall \{s_e\} \in \mathbf{Q}_D. \quad (53)$$

Que impone la condición primal de transmisión para que los flujos internos $\{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\}$ pertenezcan al subespacio ortogonal \mathbf{Q}_N . Sin embargo, dentro del contexto subdiferencial que se maneja, la desigualdad es más apropiada.

12.1 Aproximación de elemento finito en multidominio

En esta sección se introducen las aproximaciones de elemento finito mixtas macrohíbridas del problema (MHM) en términos de subespacios de elemento finito locales, sobre mallas que no necesariamente coinciden sobre las interfaces de los E subdominios; dicha aproximación no conforme se hereda de la estructura macrohíbrida del modelo, la aproximación tiene grandes ventajas en el manejo de procesos no homogéneos y multiescalas. Se consideran los siguientes espacios de elemento finito mixtos independientes localmente conformes en velocidad y presión.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{V}_{he} &= [\phi_{e,1}, \phi_{e,2}, \dots, \phi_{e,n_{he}}] \subset \mathbf{V}(\Omega_e) = \mathcal{H}(\text{div}; \Omega_e) \\ \mathbf{Y}_{he} &= [\zeta_{e,1}, \zeta_{e,2}, \dots, \zeta_{e,m_{he}}] \subset \mathbf{Y}(\Omega_e) = L^2(\Omega_e) \end{aligned} \right\} \quad (54)$$

Así como los espacios de elemento finito localmente conformes macro-híbridos de presión en las fronteras internas.

$$\mathbf{B}_{he} = [\xi_{e,1}, \xi_{e,2}, \dots, \xi_{e,k_{he}}] \subset B(\Gamma_e) = L^2(\Gamma_e). \quad (55)$$

Por lo que denotando por: $\{\boldsymbol{\alpha}_e\}$, $\{\boldsymbol{\lambda}_e\}$ y $\{\boldsymbol{\pi}_e\}$ a las coordenadas de elemento finito para la velocidad local y presión interiores, así como presiones sobre las fronteras internas, respectivamente, se busca aproximar a los siguientes campos.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u}_{he}(\mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^{n_{he}} \alpha_{e,j} \phi_{e,j}(\mathbf{x}) \in \mathbf{V}_{he} \\ p_{he}(\mathbf{x}) &= \sum_{k=1}^{m_{he}} \lambda_{e,k} \zeta_{e,k}(\mathbf{x}) \in \mathbf{Y}_{he} \\ r_{he}(\mathbf{x}) &= \sum_{l=1}^{k_{he}} \pi_{e,l} \xi_{e,l}(\mathbf{x}) \in \mathbf{B}_{he} \end{aligned} \right\} \quad (56)$$

Los cuales dan solución al siguiente problema discreto mixto macro-híbrido en velocidad y presión.

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

Para cada $e = 1, \dots, E$, las matrices y vectores están definidos para $i, j = 1, \dots, n_{he}$, $m = 1, \dots, m_{he}$ y $k = 1, \dots, k_{he}$ de la siguiente manera.

$$\left. \begin{array}{l} A_{i,j}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e^{-1}(\mathbf{x}) \phi_{e,j}(\mathbf{x}) \cdot \phi_{e,i}(\mathbf{x}) d\Omega \\ L_{m,j}^e = - \int_{\Omega_e} \zeta_{e,m}(\mathbf{x}) \operatorname{div} \phi_{e,j}(\mathbf{x}) d\Omega \\ T_{k,j}^e = \int_{\Gamma_e} \xi_{e,k}(\mathbf{x}) \phi_{e,j}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_e(\mathbf{x}) d\Gamma_e \\ f_j^e = \int_{\Omega_e} \rho_e(\mathbf{x}) \mathbf{g}_e \cdot \phi_{e,j}(\mathbf{x}) d\Omega - \int_{\partial\Omega_{De}} \hat{p}_e(\mathbf{x}) \phi_{e,j}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_e(\mathbf{x}) d\partial\Omega \\ q_m^e = \int_{\Omega_e} \hat{q}_e(\mathbf{x}) \zeta_{e,m}(\mathbf{x}) d\Omega \end{array} \right\} \quad (57)$$

En el Apéndice se da una deducción de las anteriores relaciones (\mathbf{MHM}_h) y (57). Los conjuntos de admisibilidad de las condiciones de Neumann discretas se definen en términos del interpolante de las velocidades normales prescritas a la frontera $(48)_1$, \hat{u}_{nhe} , definidas en términos de los grados de libertad de las trazas $\partial\Omega_{Ne}$ de \mathbf{V}_{he} , por,

$$\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}} = \left\{ \boldsymbol{\beta} \in \mathfrak{R}^{n_{he}} : \sum_{j=1}^{n_{he}} \beta_j \phi_{e,j} \cdot \mathbf{n}_e = \hat{u}_{nhe} \text{ sobre } \partial\Omega_{Ne} \right\}. \quad (58)$$

El espacio $\mathbf{K}_{0_{he}}$ denota las condiciones de Neumann discretas homogéneas $\sum_{j=1}^{n_{he}} \beta_j \phi_{e,j} \cdot \mathbf{n}_e = 0$ sobre $\partial\Omega_{Ne}$. Más aún, suponiendo que las aproximaciones híbridas de elemento finito (55), de los espacios de las fronteras internas coinciden en las interfaces; esto es, expresando las fronteras internas en términos de las interfaces por $\Gamma_e = \cup_{cd \in \mathcal{I}_e} \Gamma_{cd}$, $e = 1, \dots, E$, donde \mathcal{I}_e denota el correspondiente conjunto de índices de interface, suponiendo que los espacios de las fronteras internas $\mathbf{B}_{he} = \oplus_{cd \in \mathcal{I}_e} \mathbf{B}_{hcd}$, con espacios de interface conformes $\mathbf{B}_{hcd} = [\xi_{cd,1}, \xi_{cd,2}, \dots, \xi_{cd,k_{hcd}}] \subset B(\Gamma_{cd}) = L^2(\Gamma_{cd})$. Entonces el subespacio discreto dual de admisibilidad de transmisión \mathbf{Q}_{Dh} puede ser definido como la versión natural discreta del subespacio dual,

$$\mathbf{Q}_{Dh} = \left\{ \{\boldsymbol{\mu}_e\} \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{k_{he}} : \mu_{e,cd,k} = \mu_{f,cd,k}, k = 1, \dots, k_{he}, cd \in \mathcal{I}_e \cap \mathcal{I}_f, 1 \leq e < f \leq E \right\}. \quad (59)$$

En el caso general de aproximaciones híbridas completamente independientes (55), con no coincidencia en las interfaces, se deben incorporar las proyecciones o interpolaciones de las funciones aproximantes de las fronteras internas de un subdominio con respecto a sus vecinos, con el fin de imponer continuidad de interface en la definición del subespacio de sincronización \mathbf{Q}_{Dh} .

Para garantizar que el problema discreto (\mathbf{MHM}_h) está bien planteado, se tienen que satisfacer las condiciones de compatibilidad de elemento finito mixto y macro-híbrido (Roberts y Thomas, 1991; Brezzi y Fortin, 1991). En particular en Arbogast et al. (2000) se tiene una discusión y análisis de estas condiciones en el contexto de flujos Darcianos, y en Ben Belgacem (1999) se presenta un análisis para el elemento finito primal macro-híbrido o mortar.

12.2 Algoritmos de punto próximo

La solución del problema mixto macro-híbrido (\mathbf{MHM}_h) se obtiene mediante algoritmos paralelos Uzawa de tipo penalización-dualización, en esta parte se utilizan los conceptos establecidos en las secciones 8-10 de este capítulo. La metodología esta propuesta en Alduncin (1996, 1997), y desarrollada para desigualdades variacionales macro-híbridas en Alduncin (1998); dicha metodología consiste en caracterizar ecuaciones monótonas subdiferenciales en términos de resolventes o problemas de proximidad de punto-fijo. En Alduncin (1998) se presentan resultados de convergencia de los algoritmos derivados.

El algoritmo $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_1)$ del problema (\mathbf{MHM}_h) toma la siguiente forma explícita,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \{\boldsymbol{\alpha}_e^0\} \in \prod_{e=1}^E \mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}, (\{\boldsymbol{\lambda}_e^0\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^0\}) \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}} \times \mathbf{Q}_{Dh} \\ \text{conocido } \{\boldsymbol{\alpha}_e^m\}, (\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\}), m \geq 0, \text{ calcule } \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \text{ y } \boldsymbol{\lambda}_e^{m+1} \text{ para } e = 1, \dots, E : \\ \begin{aligned} (\mathbf{A}^e + r\mathbf{L}^{eT}\mathbf{L}^e + r\mathbf{T}^{eT}\mathbf{T}^e) \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \cdot \boldsymbol{\beta} = \mathbf{f}^e \cdot \boldsymbol{\beta} - \mathbf{L}^{eT} (\boldsymbol{\lambda}_e^{m+1} + r\mathbf{q}^e) \cdot \boldsymbol{\beta} \\ - \mathbf{T}^{eT} \left(\boldsymbol{\pi}_e^m - \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}} \left(\left\{ \boldsymbol{\pi}_f^m + r\mathbf{T}^f \boldsymbol{\alpha}_f^m \right\}_e \right) \right) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0_{he}} \end{aligned} \quad (\widetilde{\mathbf{ALG}}_1) \\ \boldsymbol{\lambda}_e^{m+1} = \boldsymbol{\lambda}_e^m + r\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} + r\mathbf{q}^e \\ \text{y } \{\boldsymbol{\pi}_e^{m+1}\} \in \mathbf{Q}_{Dh} \text{ de acuerdo con la sincronización} \\ \{\boldsymbol{\pi}_e^{m+1}\} = \{\boldsymbol{\pi}_e^m + r\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\} - \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}} \left(\{\boldsymbol{\pi}_e^m + r\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\} \right). \end{array} \right.$$

En el Apéndice se da una deducción del anterior algoritmo.

De manera similar es posible deducir un segundo tipo de algoritmo de dualidad penalización del problema mixto macro-híbrido (\mathbf{MHM}_h) , pero ahora considerando la formulación en tres campos del problema. Los algoritmos $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_2)$ y $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_3)$ toman la siguiente forma explícita,

$$\left\{ \begin{array}{l}
\text{Dado } (\{\boldsymbol{\lambda}_e^0\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^0\}) \in \prod_{e=1}^E \Re^{m_{he}} \times \mathbf{Q}_{Dh}, \text{ conocido } (\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\}), m \geq 0, \\
\text{calcule } \{\boldsymbol{\mu}_e^{m+1}\} \text{ de acuerdo con la sincronización} \\
\{\boldsymbol{\mu}_e^{m+1}\} = \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}} \left(\left\{ \frac{1}{r} \boldsymbol{\pi}_e^m + \mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m \right\} \right) \\
\text{y en paralelo } \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \text{ y } (\boldsymbol{\lambda}_e^{m+1}, \boldsymbol{\pi}_e^{m+1}) \text{ para } e = 1, \dots, E : \\
(\mathbf{A}^e + r \mathbf{L}^{eT} \mathbf{L}^e + r \mathbf{T}^{eT} \mathbf{T}^e) \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \cdot \boldsymbol{\beta} = \\
\quad (\mathbf{f}^e - \mathbf{L}^{eT} (\boldsymbol{\lambda}_e^m + r \mathbf{q}^e) - \mathbf{T}^{eT} (\boldsymbol{\pi}_e^m - r \boldsymbol{\mu}_e^{m+1})) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0_{he}} \\
\boldsymbol{\lambda}_e^{m+1} = \boldsymbol{\lambda}_e^m + r (\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} + \mathbf{q}^e) \\
\boldsymbol{\pi}_e^{m+1} = \boldsymbol{\pi}_e^m + r (\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} - \boldsymbol{\mu}_e^{m+1})
\end{array} \right. \quad (\widetilde{\mathbf{ALG}}_2)$$

y,

$$\left\{ \begin{array}{l}
\text{Dado } (\{\boldsymbol{\lambda}_e^0\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^0\}) \in \prod_{e=1}^E \Re^{m_{he}} \times \mathbf{Q}_{Dh}; \text{ conocido } (\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\}), m \geq 0, \\
\text{calcule } \{\boldsymbol{\mu}_e^{m+1}\} \text{ de acuerdo con la sincronización} \\
\{\boldsymbol{\mu}_e^{m+1}\} = \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}} \left(\left\{ \frac{2}{r} \boldsymbol{\pi}_e^m + \mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m \right\} \right) \\
\text{y en paralelo } (\boldsymbol{\lambda}_e^{m+1/2}, \boldsymbol{\pi}_e^{m+1/2}), \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \text{ y } (\boldsymbol{\lambda}_e^{m+1}, \boldsymbol{\pi}_e^{m+1}) \text{ para } e = 1, \dots, E : \\
\boldsymbol{\lambda}_e^{m+1/2} = \boldsymbol{\lambda}_e^m + \frac{r}{2} (\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m + \mathbf{q}_e^{m+1}) \\
\boldsymbol{\pi}_e^{m+1/2} = \boldsymbol{\pi}_e^m + \frac{r}{2} (\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m - \boldsymbol{\mu}_e^{m+1}) \\
(\mathbf{A}^e + \frac{r}{2} \mathbf{L}^{eT} \mathbf{L}^e + \frac{r}{2} \mathbf{T}^{eT} \mathbf{T}^e) \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \cdot \boldsymbol{\beta} = \\
\quad (\mathbf{f}^e - \mathbf{L}^{eT} (\boldsymbol{\lambda}_e^{m+1/2} + \frac{r}{2} \mathbf{q}^e) - \mathbf{T}^{eT} (\boldsymbol{\pi}_e^{m+1/2} - \frac{r}{2} \boldsymbol{\mu}_e^{m+1})) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0_{he}} \\
\boldsymbol{\lambda}_e^{m+1} = \boldsymbol{\lambda}_e^{m+1/2} + \frac{r}{2} (\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} + \mathbf{q}^e) \\
\boldsymbol{\pi}_e^{m+1} = \boldsymbol{\pi}_e^{m+1/2} + \frac{r}{2} (\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} - \boldsymbol{\mu}_e^{m+1})
\end{array} \right. \quad (\widetilde{\mathbf{ALG}}_3)$$

La deducción de los algoritmos $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_2)$ y $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_3)$ es similar a la del $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_1)$ que se da en el Apéndice. En Alduncin y Vera (2003) se implementan en Fortran 77 los algoritmos $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_1)$ - $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_3)$ y presentan ejemplos sintéticos de problemas en velocidad y presión que prueban el procedimiento que se acaba de exponer. Sin embargo, el objetivo de este trabajo se centra en el problema de transporte, situación que se discute con detalle en la siguiente sección.

13 El problema de transporte advectivo dominante

En esta sección se presenta la metodología desarrollada para abordar el problema de transporte advectivo dominante, desde la perspectiva de análisis convexo, subdiferenciales, elemento finito y resolventes. El flujo y transporte de contaminantes en acuíferos está determinado por: las fuerzas físicas, interacciones químicas,

geometría y la distribución de parámetros de las unidades geológicas imperantes de cada sitio. En él ocurren simultáneamente dos componentes cinemáticas: i) el de la velocidad promedio o de Darcy \mathbf{u} , que se conoce como término advectivo; y ii) la tendencia del soluto a diluirse debido a la dispersión mecánica y difusión molecular, a estos términos se les conoce como dispersión hidrodinámica o difusión convectiva, en adelante se denota como término de difusión (Freeze y Cherry, 1979; Bear y Verruijt, 1987; Bear, 1972 y Fetter, 1993). Para fines de simplificación, se suponen las siguientes hipótesis de trabajo: i) el fenómeno de advección-difusión se da en condiciones isotérmicas; ii) el flujo es totalmente saturado por una sola fase líquida; iii) la fase líquida es incompresible; iv) la matriz sólida no sufre deformación (no se consolida); y que v) el trazador de concentración c sufre absorción cinética de primer orden, esta hipótesis incluye el caso en que el proceso de absorción es irreversible, lento con respecto a la velocidad del flujo y que no alcanza el equilibrio.

El acuífero en estudio ocupa una región $\Omega \subset \mathfrak{R}^3$, con frontera $\partial\Omega \subset \mathfrak{R}^2$ donde se analiza el movimiento de un soluto de concentración c , que satisface las anteriores hipótesis de trabajo en un intervalo de tiempo $(0, T)$. La ecuación de balance de masa para el soluto está dada por,

$$\frac{\partial c}{\partial t}(\mathbf{x}, t) - \text{div} \{ \mathbf{D}(\mathbf{x}) \nabla c(\mathbf{x}, t) \} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla c(\mathbf{x}, t) + d(\mathbf{x})c(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T). \quad (60)$$

En donde c es la masa de contaminante por unidad de volumen de solución, d el coeficiente de absorción cinética irreversible de primer orden, f es el término de fuente/sumidero para el contaminante, \mathbf{u} la velocidad de Darcy, \mathbf{D} es el tensor de dispersividad, \mathbf{x} denota las coordenadas espaciales $(x_1, x_2, x_3) \in \Omega \subset \mathfrak{R}^3$; mientras que t al tiempo.

Con respecto a las condiciones generales de valores inicial y a la frontera, primeramente se tiene que la frontera de Ω es la unión disjunta de una porción Dirichlet $\partial\Omega_D$ y otra Neumann $\partial\Omega_N$, es decir $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$; de tal manera que al tiempo $t = 0$ la función de concentración asume el valor c_0 ; con una condición de Dirichlet c_D en la frontera $\partial\Omega_D$ y una condición de Neumann c_N en la porción de frontera $\partial\Omega_N$ en todo tiempo posterior, es decir,

$$\begin{cases} c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega \\ \gamma c(\mathbf{x}, t) = c_D(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_D \times (0, T) \\ -\mathbf{D}(\mathbf{x}) \nabla c(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t) = -c_N(\mathbf{x}, t; \gamma c(\mathbf{x}, t)), & (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_N \times (0, T) \end{cases} \quad (61)$$

La ecuación de balance de masa para el trazador de concentración c , (60), en conjunto con la Ley de Darcy conforman las relaciones de campo para el transporte de un contaminante soluble en acuíferos; de hecho la Ley de Darcy se deriva de la ecuación de movimiento de Cauchy vía las ecuaciones de Navier-Stokes más algunas hipótesis y relaciones constitutivas, (Whitaker, 1966 y 1986).

Los estudios de campo de caracterización y monitoreo continuo de los sitios permiten determinar: las funciones f , d y el tensor \mathbf{D} (equivalentemente las dispersividades longitudinal y transversal), la velocidad promedio de Darcy \mathbf{u} (solución del problema de flujo), así como las condiciones hidrogeológicas de contorno para el acuífero. Con lo que es posible establecer para (60) el problema clásico de valores inicial y a la frontera, con lo que se obtiene el correspondiente modelo de transporte del sitio (Marsden y Hughes, 1983; Fritz, 1982 y Gurtin, 1981).

Al igual que las condiciones en el interior, inicial y sobre la frontera; las restricciones en el interior y sobre la frontera nacen a partir de imposiciones físicas, adicionales, sobre el campo solución c . Por lo que, de igual manera es posible establecer el problema control de valores inicial y a la frontera para analizar el transporte de una sustancia disuelta en un campo de flujo subterráneo (Martínez Nájera, 2002 y Martínez Nájera et al., 2005). El problema de contaminación surge cuando la concentración c de uno o más solutos, sobrepasan los límites de calidad del agua preestablecidos por la normatividad. De este modo si c representa la concentración de un contaminante disuelto en un campo de flujo de un acuífero, entonces la restricción,

$$c \leq \bar{c}, \quad \text{para cada } (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T), \quad (62)$$

establece que el valor de concentración no debe rebasar el límite dado por \bar{c} ; en cuyo caso, la magnitud \bar{c} denota los valores máximos permisibles de concentración para los solutos presentes en el agua para un uso determinado, NOM-127-SSA1 (1994). La restricción anterior es modelada por la siguiente funcional convexa propia y semicontinua inferiormente ϕ , Figura 1a; el subdiferencial $\partial\phi$, la polar de ϕ , es decir ϕ^* y subdiferencial $\partial\phi^*$, también se indican en la misma relación y figura.

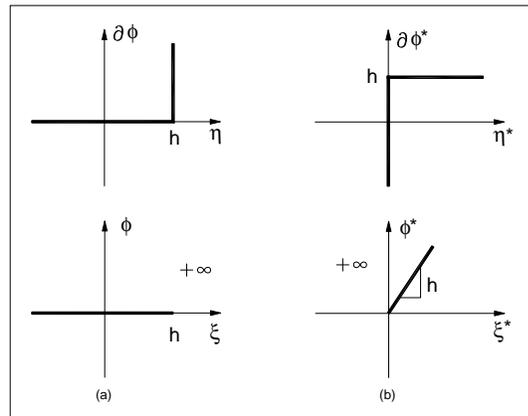


Figura 1. Funcionales ϕ y ϕ^* y subdiferenciales asociados.

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta \in \mathcal{D}(\phi) = \{\xi \in \mathfrak{R} : \xi \leq h\} \quad : \quad \eta^* \in \partial\phi(\eta) = \begin{cases} \{0\}, & \eta < h \\ [0, +\infty), & \eta = h \end{cases} \\ \eta^* \in \mathcal{D}(\phi^*) = \{\xi^* \in \mathfrak{R} : \xi^* \geq 0\} \quad : \quad \eta \in \partial\phi^*(\eta^*) = \begin{cases} (-\infty, h], & \eta^* = 0 \\ \{h\}, & \eta^* > 0 \end{cases} \end{array} \right. \quad (63)$$

El mecanismo de control que implementa la anterior restricción esta dado por el subdiferencial de ϕ , $\partial\phi$. La función del mecanismo de control (63)₁ es mantener que la anterior restricción (62), sea satisfecha en cada posición \mathbf{x} del acuífero. Cuando la concentración c tiende a ser mayor que \bar{c} , el mecanismo determina la extracción de contaminante en una cantidad contenida en el intervalo $[0, +\infty)$, Figura 1a; mientras que, cuando la concentración es menor que \bar{c} el mecanismo no efectúa ninguna acción (Martínez Nájera, 1992 y 2002).

De acuerdo con las secciones 8 y 9 de este capítulo, el primer paso en el proceso heurístico constructivo de la solución del problema (60 y 61) de control del balance de transporte, es caracterizar las condiciones y restricciones interior y a la frontera en términos de subdiferenciales de funcionales convexas, propias y semicontinuas inferiormente, (62), (63) y (41). Bajo este enfoque y con el uso del Lema 1, se establece la formulación variacional primal local del problema (60 y 61), refiérase al problema (V) de la sección 9 (Martínez Nájera, 2002). De este modo, con el uso de la expresión (V), (41) y Lema 1 es posible obtener la siguiente relación en términos de subdiferenciales para el control del transporte de solutos expresado en (60) y (61),

$$\left\{ \begin{array}{l} c(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\phi(\mathbf{x}, t; \cdot)) : \\ \left\{ -\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}\{\mathbf{D}\nabla c\} - \mathbf{u} \cdot \nabla c - dc + f \right\} \in \partial\phi(\mathbf{x}, t; c(\mathbf{x}, t)), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \\ \gamma c(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\psi(\mathbf{x}, t; \cdot)) : \\ \{-\mathbf{D}\nabla c \cdot \mathbf{n}\} \in \partial\psi(\mathbf{x}, t; \gamma c(\mathbf{x}, t)), \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_i \times (0, T), \quad i = D, N \\ \text{con } c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{array} \right. \quad (64)$$

La relación anterior en términos de la caracterización de subdiferenciales dada en (36) se traduce en la siguiente desigualdad variacional,

$$\left\{ \begin{array}{l}
c(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\phi(\mathbf{x}, t; \cdot)) : \\
\left\{ \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}\{\mathbf{D}\nabla c\} + \mathbf{u} \cdot \nabla c + dc \right\} \{v - c\} \\
+ \phi(\mathbf{x}, t; v) - \phi(\mathbf{x}, t; c) \geq f \{v - c\}, \quad \forall v(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\phi(\mathbf{x}, t; \cdot)), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \\
\\
\gamma c(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\psi(\mathbf{x}, t; \cdot)) : \\
\psi(\mathbf{x}, t; \gamma v) - \psi(\mathbf{x}, t; \gamma c) \geq \\
\{-\mathbf{D}\nabla c \cdot \mathbf{n}\} \{\gamma v - \gamma c\}, \quad \forall \gamma v(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\psi(\mathbf{x}, t; \cdot)), \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_i \times (0, T), \quad i = D, N \\
\\
\text{con } c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega
\end{array} \right. \quad (65)$$

A partir de la anterior formulación variacional primal local se obtiene la siguiente formulación variacional global primal para el problema de control en el transporte especificado en (60 y 61),

$$\left\{ \begin{array}{l}
\text{Para } t \in (0, T), \text{ dado } f(t) \in L^2(\Omega) \text{ encuentre } c(t) \in K(t) : \\
\int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial t} \{v - c\} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla c \cdot \{\nabla v - \nabla c\} d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla c) \{v - c\} d\Omega + \int_{\Omega} dc \{v - c\} d\Omega \\
+ \int_{\Omega} \phi(\cdot; v) d\Omega - \int_{\Omega} \phi(\cdot; c) d\Omega + \int_{\partial\Omega} \psi(\cdot; \gamma v) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega} \psi(\cdot; \gamma c) d\partial\Omega \\
\geq \int_{\Omega} f \{v - c\} d\Omega, \quad v \in K(t) \\
\\
\text{con } c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega
\end{array} \right. \quad (\text{MTP})$$

Donde el campo de funciones admisibles $K(t)$ está dado de la siguiente manera,

$$K(t) = \{v \in H^1(\Omega) : v(\mathbf{x}) \in \mathcal{D}(\phi(\mathbf{x}, t; \cdot)) \text{ ct } \mathbf{x} \in \Omega, \gamma v(\mathbf{x}) \in \mathcal{D}(\psi(\mathbf{x}, t; \cdot)) \text{ ct } \mathbf{x} \in \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N\}. \quad (66)$$

En el Apéndice se da una deducción de la anterior formulación débil (MTP).

Para obtener las formas mixtas, primeramente es necesario obtener las expresiones duales de (64 y 65); para lo cual se definen los siguientes campos duales,

$$\left. \begin{array}{l}
\lambda^*(\mathbf{x}, t) = -\frac{\partial c}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div}\{\mathbf{D}(\mathbf{x})\nabla c(\mathbf{x}, t)\} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla c(\mathbf{x}, t) - d(\mathbf{x})c(\mathbf{x}, t) + f(\mathbf{x}, t), \\
\mu^*(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{D}(\mathbf{x})\nabla c(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, T)
\end{array} \right\} \quad (67)$$

cuyas variaciones son η^* y ν^* , respectivamente. Por lo que, del Lema 1, la forma dual de (64) es la siguiente,

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda^*(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\phi^*(\mathbf{x}, t; \cdot)) : c(\mathbf{x}, t) \in \partial\phi^*(\mathbf{x}, t; \lambda^*(\mathbf{x}, t)), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \\ \mu^*(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\psi^*(\mathbf{x}, t; \cdot)) : \gamma c(\mathbf{x}, t) \in \partial\psi^*(\mathbf{x}, t; \mu^*(\mathbf{x}, t)), \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_i \times (0, T), i = D, N \\ \text{con } c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{array} \right. \quad (68)$$

Así como también, mediante el uso de (38), se obtiene la siguiente desigualdad variacional,

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda^*(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\phi^*(\mathbf{x}, t; \cdot)) : \phi^*(\mathbf{x}, t; \eta^*(\mathbf{x}, t)) - \phi^*(\mathbf{x}, t; \lambda^*(\mathbf{x}, t)) \\ \geq c(\mathbf{x}, t) \{\eta^*(\mathbf{x}, t) - \lambda^*(\mathbf{x}, t)\}, \quad \eta^*(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\phi^*(\mathbf{x}, t; \cdot)), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \\ \\ \mu^*(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\psi^*(\mathbf{x}, t; \cdot)) : \psi^*(\mathbf{x}, t; \nu^*(\mathbf{x}, t)) - \psi^*(\mathbf{x}, t; \mu^*(\mathbf{x}, t)) \\ \geq \gamma c(\mathbf{x}, t) \{\nu^*(\mathbf{x}, t) - \mu^*(\mathbf{x}, t)\}, \quad \nu^*(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(\psi^*(\mathbf{x}, t; \cdot)), (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_i \times (0, T), i = D, N \\ \\ \text{con } c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{array} \right. \quad (69)$$

Para evitar confusión se han explicitado los argumentos de las variables, en adelante se prescindirá de ellos, tanto como sea posible. Mediante el uso del Lema 1, (64), (65), (68) y (69) es posible obtener la formulación variacional mixta global de control interno dualizado, la cual se expresa de la siguiente forma,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para } t \in (0, T), \text{ encuentre } [c(t), \lambda^*(t)] \in K_{\mathcal{D}(\psi)(t)} \times S_{\mathcal{D}(\phi^*)(t)} : \\ \int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial t} \{v - c\} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla c \cdot \{\nabla v - \nabla c\} d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla c) \{v - c\} d\Omega + \int_{\Omega} dc \{v - c\} d\Omega \\ + \int_{\partial\Omega} \psi(\cdot; \gamma v) d\partial\Omega - \int_{\partial\Omega} \psi(\cdot; \gamma c) d\partial\Omega \geq \int_{\Omega} \{f - \lambda^*\} \{v - c\} d\Omega, \quad v \in K_{\mathcal{D}(\psi)(t)} \\ \\ \int_{\Omega} \phi^*(\cdot; \eta^*) d\Omega - \int_{\Omega} \phi^*(\cdot; \lambda^*) d\Omega - \int_{\Omega} c \{\eta^* - \lambda^*\} d\Omega \geq 0, \quad \eta^* \in S_{\mathcal{D}(\phi^*)(t)} \\ \\ \text{con } c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{array} \right. \quad (\text{MTM})$$

Para esta formulación se tienen los siguientes espacios involucrados,

$$\begin{cases} S_{\mathcal{D}(\phi^*)}(t) = \{\eta^* \in L^2(\Omega) : \eta^*(\mathbf{x}) \in \mathcal{D}(\phi^*(\mathbf{x}, t; \cdot)) \text{ ct } \mathbf{x} \in \Omega\} \\ K_{\mathcal{D}(\psi)}(t) = \{v \in H^1(\Omega) : \gamma v(\mathbf{x}) \in \mathcal{D}(\psi(\mathbf{x}, t; \cdot)) \text{ ct } \mathbf{x} \in \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N\} \end{cases} \quad (70)$$

En el Apéndice se da una deducción de la formulación **(MTM)**. Para lograr las versiones discretas de **(MTP)** y **(MTM)** primeramente se efectúan las aproximaciones internas, de acuerdo con Temam (1970), y se definen las bases para los subespacios de elemento finito y de dimensión finita V_h y W_h , para los campos primales y duales, respectivamente,

$$\begin{cases} V_h = \text{Span} \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{m_h}\} \subset H^1(\Omega) \\ W_h = \text{Span} \{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{r_h}\} \subset L^2(\Omega) \end{cases} \quad (71)$$

De tal forma que denotando por $\{\alpha_j\}$ y a $\{\xi_j\}$ a las coordenadas de elemento finito para la concentración c y su campo dual λ^* , respectivamente; mientras que por $\{\beta_i\}$ y a $\{\delta_i\}$ a las de sus variaciones asociadas,

$$\begin{cases} c_{he}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{m_h} \alpha_j(t) \varphi_j(\mathbf{x}); & v_{he}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m_h} \beta_i \varphi_i(\mathbf{x}) \\ \lambda_{he}^*(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{r_h} \xi_j(t) \psi_j(\mathbf{x}); & \eta_{he}^*(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{r_h} \delta_i \psi_i(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (72)$$

Para obtener las versiones discretas de **(MTP)** y **(MTM)**, vía elemento finito en el espacio, primeramente se define una triangulación o partición de Ω (del acuífero, medio poroso o fracturado) denominada \mathcal{T}^h compuesta por r_h elementos triangulares cerrados e_k , de tal forma que $\bar{\Omega} = \cup_{k=1}^{r_h} e_k$. Los vértices internos de la triangulación se denotan por P_j con $j = 1, \dots, m_h$; los de la frontera Neumann $\partial\Omega_N$ por P_i con $i = m_h + 1, \dots, M$; mientras que los de la frontera Dirichlet $\partial\Omega_D$ por P_l con $l = M + 1, \dots, L$. Más aún, se supondrá que la triangulación es de tipo débilmente aguda, en donde cada triángulo e_k de \mathcal{T}^h contiene ángulos menores o iguales a $\pi/2$. Finalmente, para completar la discretización en el tiempo se aplica un esquema θ en el tiempo.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } f \in L^2(0, T; L^2(\Omega)), \text{ encuentre } \{\alpha(t^{n+\theta})\}_{n=0}^{N_{\Delta t}} \subset K^{m_h}(t^{n+\theta}) : \\ \{\mathbf{A}\mathcal{D}_{\Delta t}\alpha(t^n) + \mathbf{B}\alpha(t^{n+\theta}) + \mathbf{C}(t^{n+\theta})\alpha(t^{n+\theta}) + \mathbf{D}\alpha(t^{n+\theta})\} \cdot \{\beta - \alpha(t^{n+\theta})\} + \\ \quad \Phi(t^{n+\theta}; \beta) - \Phi(t^{n+\theta}; \alpha(t^{n+\theta})) + \Psi(t^{n+\theta}; \beta) - \Psi(t^{n+\theta}; \alpha(t^{n+\theta})) \\ \quad \geq \mathbf{f}(t^{n+\theta}) \cdot \{\beta - \alpha(t^{n+\theta})\}, \quad \forall \beta \in K^{m_h}(t^{n+\theta}) \\ \text{con } \alpha_j(0) = c_{0h}(P_j), \quad j = 1, \dots, m_h, \quad P_j \in \Omega \end{array} \right. \quad (\text{MTP}_h)$$

y,

$$\left\{ \begin{array}{l}
\text{Encuentre } \{\boldsymbol{\alpha}(t^n), \boldsymbol{\xi}(t^n)\}_{n=0}^{N_{\Delta t}} \subset J^{m_h}(t^n) \times \mathfrak{R}^{r_h} : \\
\{\mathbf{A}\mathcal{D}_{\Delta t}\boldsymbol{\alpha}(t^n) + \mathbf{B}\boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta}) + \mathbf{C}(t^{n+\theta})\boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta}) + \mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})\} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})\} + \\
\quad \Psi(t^{n+\theta}; \boldsymbol{\beta}) - \Psi(t^{n+\theta}; \boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})) \\
\geq \{\mathbf{f}(t^{n+\theta}) - \mathbf{E}\boldsymbol{\xi}(t^{n+\theta})\} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})\}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in J^{m_h}(t^n) \\
\Phi^*(t^{n+1}; \boldsymbol{\delta}) - \Phi^*(t^{n+1}; \boldsymbol{\xi}(t^{n+1})) \geq \mathbf{E}^T \boldsymbol{\alpha}(t^{n+1}) \cdot \{\boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{\xi}(t^{n+1})\}, \quad \forall \boldsymbol{\delta} \in \mathfrak{R}^{r_h} \\
\text{con } \alpha_j(0) = c_{0h}(P_j), \quad j = 1, \dots, m_h, \quad P_j \in \Omega
\end{array} \right. \quad (\text{MTM}_h)$$

Donde P_j son los v\u00e9rtices internos de la triangulaci\u00f3n \mathcal{T}^h de Ω . En el Ap\u00e9ndice se da una deducci\u00f3n de las formulaciones (MTP_h) y (MTM_h) . Las matrices y vectores participantes est\u00e1n caracterizados de la siguiente manera,

$$\left. \begin{array}{l}
A_{ij} = \int_{\Omega} \varphi_j(\mathbf{x})\varphi_i(\mathbf{x}) d\Omega; \quad B_{ij} = \int_{\Omega} \mathbf{D}(\mathbf{x})\nabla\varphi_j(\mathbf{x}) \cdot \nabla\varphi_i(\mathbf{x}) d\Omega \\
C_{ij}(t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla\varphi_j(\mathbf{x})\varphi_i(\mathbf{x}) d\Omega \\
D_{ij} = \int_{\Omega} d(\mathbf{x})\varphi_j(\mathbf{x})\varphi_i(\mathbf{x}) d\Omega; \quad E_{ik} = \int_{\Omega} \psi_k(\mathbf{x})\varphi_i(\mathbf{x}) d\Omega; \quad f_i(t) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}, t)\varphi_i(\mathbf{x}) d\Omega \\
\Phi(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) = \int_{\Omega} \phi \left[\mathbf{x}, t; \sum_{j=1}^{m_h} \alpha_j(t)\varphi_j(\mathbf{x}) \right] d\Omega \\
\Psi(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) = \int_{\partial\Omega} \phi \left[\mathbf{x}, t; \sum_{j=1}^{m_h} \alpha_j(t)\gamma\varphi_j(\mathbf{x}) \right] d\partial\Omega \\
\Phi^*(t; \boldsymbol{\xi}(t)) = \int_{\Omega} \phi^* \left[\mathbf{x}, t; \sum_{j=1}^{r_h} \xi_j(t)\psi_j(\mathbf{x}) \right] d\Omega
\end{array} \right\} \quad (73)$$

En donde $i, j = 1, \dots, m_h$ y $k = 1, \dots, r_h$. A la matriz \mathbf{A} se le denomina t\u00e9rmino de masa, a la \mathbf{B} de difusi\u00f3n, a la \mathbf{C} t\u00e9rmino advectivo, a la \mathbf{E} de acoplamiento, y a la matriz \mathbf{D} y vector \mathbf{f} de fuente. Donde adem\u00e1s se tienen las siguientes definiciones,

$$\left\{ \begin{array}{l}
h(t^{n+\theta}) = (1 - \theta)h(t^n) + \theta h(t^{n+1}), \quad 0 < \theta < 1 \\
\mathcal{D}_{\Delta t}h(t^n) = \frac{h(t^{n+1}) - h(t^n)}{\Delta t} = \frac{h(t^{n+\theta}) - h(t^n)}{\theta\Delta t}, \quad \Delta t = t^{n+1} - t^n \\
N_{\Delta t} = \text{entero} \left[\frac{T}{\Delta t} \right], \quad \text{y } T \text{ es el tiempo total de estudio}
\end{array} \right. \quad (74)$$

Finalmente en Duvaut y Lions (1972) se discute la existencia, unicidad y comportamiento exponencialmente asint\u00f3tico a estados de equilibrio, cuando el tiempo tiende a infinito, del modelo (MTP) ; en Alduncin

y Carrera (1991) se proponen las condiciones suficientes para que el modelo primal en aproximaciones internas satisfaga los resultados clásicos de existencia y unicidad; en Ikeda (1983) se presentan las condiciones necesarias y suficientes para que el problema lineal discreto (\mathbf{MTP}_h) satisfaga el principio de máximo y de conservación de masa discretos, así como su convergencia uniforme en $L^\infty(\Omega)$, luego de aplicar el upwind parcial al término advectivo C_{ij} , en (73)₂.

Debido a la asimetría del término advectivo, C_{ij} , y cuando la magnitud de velocidad $\|\mathbf{u}\|$ tiende a dominar sobre la magnitud del término de difusión $\|\mathbf{D}\|$, (73)_{1,2}, los esquemas de solución que no consideran esta situación no son los adecuados para la solución numérica de (60 y 61); debido a que sus versiones numéricas no satisfacen el principio de máximo y algunas veces tampoco el de conservación de masa discretos. De este modo, los esquemas de upwind se han desarrollado para remediar los problemas que presentan las aproximaciones usuales cuando el número de Péclet,

$$P_e = \frac{\|\mathbf{u}\|}{\|\mathbf{D}\|} (\text{tamaño de } \bar{\Omega}) \quad (75)$$

tiende a ser grande (usualmente para números ≥ 2.5). En la siguiente sección se comenta el tipo de upwind implementado en este trabajo con la finalidad de que las soluciones numéricas de (60 y 61), es decir (\mathbf{MTP}_h y \mathbf{MTM}_h), resulten robustas ante situaciones advectivo dominantes.

13.1 Aproximación del término advectivo

Para cada tiempo $\tau \in \mathfrak{R}$ fijo, la entrada del término advectivo \mathbf{C} está dada por (73)₂. La naturaleza hiperbólico-parabólica de la ecuación de balance de masa (60), cuando la advección domina, genera soluciones físicamente inadmisibles con los esquemas clásicos de elemento y diferencias finitas, debido a que las versiones numéricas de la ecuación (60) no satisfacen el principio de máximo y, en otras ocasiones tampoco al principio de conservación de masa discretos. Debido a esta observación, en el trabajo se aproxima al término advectivo (73)₂ mediante la técnica de upwind parcial, propuesta originalmente por Ikeda (1983), la cual satisface los mencionados principios de máximo y de conservación de masa.

El esquema está diseñado para reducir la viscosidad artificial del esquema de Kanayama (Ikeda, 1983); para lo cual divide al término advectivo, ecuación (73)₂, en una combinación convexa de sí misma para cada $\tau \in \mathfrak{R}$ fijo,

$$\bar{C}_{ij}(\tau) = \varepsilon_{ij} C_{ij}(\tau) + (1 - \varepsilon_{ij}) C_{ij}(\tau), \quad 0 \leq \varepsilon_{ij} \leq 1 \quad (76)$$

En donde al primer término del segundo miembro se le aplica la técnica de upwind de Kanayama; mientras que al segundo término se le aplica el esquema de viscosidad artificial de Ikeda. El valor de ε_{ij}

es asignado para cada lado $P_i P_j$ definido por el par de vértices P_i y P_j que definen un elemento e de la partición de Ω , \mathcal{T}^h , y se define como el valor mínimo con el cual los esquemas resultantes (**MTP_h** y **MTM_h**) satisfacen el principio de máximo,

$$\varepsilon_{ij} = \max \left\{ 0, 1 - 2 \|\mathbf{D}\| \frac{\text{Longitud de } (\tilde{\Gamma}_{ij})}{|\tilde{b}_{ij}| \overline{P_i P_j}} \right\},$$

donde $\tilde{\Gamma}_{ij} = \tilde{\Gamma}_i \cap \tilde{\Gamma}_j$ y $\tilde{\Gamma}_i$ es la frontera del dominio circuncéntrico $\tilde{\Omega}_i$ asociado a la partición consistente $\{e_i^k\}$ que forma la vecindad del nodo P_i ; $\overline{P_i P_j}$ es la longitud del lado de e definido por P_i y P_j ; mientras que \tilde{b}_{ij} está dado por,

$$\tilde{b}_{ij} = \mathbf{u}(P_{ij}, \tau) \cdot \int_{\tilde{\Gamma}_{ij}} \mathbf{n}_i d\Gamma = \left(\text{Longitud de } (\tilde{\Gamma}_{ij}) \right) \mathbf{u}(P_{ij}, \tau) \cdot \left(\overrightarrow{P_i P_j} / \overline{P_i P_j} \right)$$

donde $\overrightarrow{P_i P_j}$ es el vector que va de P_i a P_j ; y $P_{ij} \in \tilde{\Gamma}_{ij}$ (Martínez Nájera, 1992). Por lo que la entrada ij de la matriz del término advectivo, \mathbf{C} , está dada por,

$$\overline{C}_{ij}(\tau) = \begin{cases} - \sum_{k \in \Lambda_i} \tilde{b}_{ik} \left\{ \varepsilon_{ik} \left(1 - H(\tilde{b}_{ik}) \right) + \frac{1}{2} (1 - \varepsilon_{ik}) \right\}, & \text{para } j = i \\ \tilde{b}_{ij} \left\{ \varepsilon_{ij} \left(1 - H(\tilde{b}_{ij}) \right) + \frac{1}{2} (1 - \varepsilon_{ij}) \right\}, & \text{para } j \in \Lambda_i \\ 0, & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (77)$$

En donde Λ_i denota el conjunto de vértices de la partición de Ω , \mathcal{T}^h ; mientras que H es la función de Heaviside definida por,

$$H(x) = \begin{cases} 0, & \text{para } x \leq 0 \\ 1, & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

En el siguiente capítulo se presenta un ejemplo hipotético que permite probar el procedimiento que se propone ante situaciones advectivo dominantes y ante situaciones en los que la concentración c pueda exceder o no la restricción \bar{c} indicada en (62).

13.2 Algoritmos iterativos tipo Uzawa

A partir de las formulaciones (**MTP_h**) y (**MTM_h**) es posible identificar los siguientes dos tipos de desigualdades variacionales algebraicas (Martínez Nájera, 1992),

$$\begin{cases} \text{Encuentre } \boldsymbol{\alpha} \in K_1 : \mathbf{H}\boldsymbol{\alpha} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}\} \geq \mathbf{b} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}\}, & \forall \boldsymbol{\beta} \in K_1 \\ \text{Encuentre } \boldsymbol{\xi} \in K_2 : \Phi^*(\boldsymbol{\delta}) - \Phi^*(\boldsymbol{\xi}) \geq \mathbf{J}\boldsymbol{\alpha} \cdot \{\boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{\xi}\}, & \forall \boldsymbol{\delta} \in K_2 \end{cases} \quad (78)$$

Donde K_1 y K_2 son conjuntos convexos no vacíos y cerrados para cada $t \in (0, T)$. La resolución de las anteriores desigualdades se obtiene relacionándolas con el problema de Euler-Lagrange del problema de optimización de proximidad relativo a λj ó $r\phi$ indicados en (T1)-(T3) y (L2), respectivamente. De este modo el problema (78)₁ en términos del problema de Euler-Lagrange, se describe de la siguiente forma,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para } \rho > 0; \text{ encuentre } \boldsymbol{\alpha} \in K_1 : \\ [\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha} + \rho \{\mathbf{H}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{b}\}] \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}\} + I_{K_1}(\boldsymbol{\beta}) - I_{K_1}(\boldsymbol{\alpha}) \geq 0, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K_1 \end{array} \right. \quad (79)$$

Por lo que si usamos (T2) y tomamos,

$$\lambda j = I_{K_1}; \quad v = \boldsymbol{\beta}; \quad w = \boldsymbol{\alpha} - \rho \{\mathbf{H}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{b}\}; \quad \eta = \boldsymbol{\alpha}. \quad (80)$$

Se determina que (78)₁, alternativamente (79), en términos del mapeo *Prox*, está dado por la siguiente expresión,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para } \rho > 0; \text{ encuentre } \boldsymbol{\alpha} \in K_1 : \\ \boldsymbol{\alpha} = \arg \left(\inf_{\boldsymbol{\beta} \in K_1} \left\{ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta} - (\boldsymbol{\alpha} - \rho \{\mathbf{H}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{b}\})\|_{\mathbf{W}}^2 + I_{K_1}(\boldsymbol{\beta}) \right\} \right) \\ = \text{Prox}_{I_{K_1}}[\boldsymbol{\alpha} - \rho \{\mathbf{H}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{b}\}] = \text{Proy}_{K_1}[\boldsymbol{\alpha} - \rho \{\mathbf{H}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{b}\}] \end{array} \right. \quad (81)$$

Donde notamos que para el caso en el que λj es la indicatriz de K_1 , entonces la función de proximidad se corresponde con la proyección sobre K_1 .

Por otra parte, para resolver desigualdades del tipo (78)₂; de manera similar se tiene el siguiente problema asociado de Euler-Lagrange,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para } \sigma > 0; \text{ encuentre } \boldsymbol{\xi} \in K_2 : \\ [\boldsymbol{\xi} - (\boldsymbol{\xi} + \sigma \mathbf{J}\boldsymbol{\alpha})] \cdot \{\boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{\xi}\} + \sigma \Phi^*(\boldsymbol{\delta}) - \sigma \Phi^*(\boldsymbol{\xi}) \geq 0, \quad \forall \boldsymbol{\delta} \in K_2 \end{array} \right. \quad (82)$$

Por lo que si usamos (T2) y tomamos,

$$\lambda j = \sigma \Phi^*; \quad v = \boldsymbol{\delta}; \quad w = \boldsymbol{\xi} + \sigma \mathbf{J}\boldsymbol{\alpha}; \quad \eta = \boldsymbol{\xi}. \quad (83)$$

De este modo, la solución de (78)₂, o bien (82), en términos del mapeo *Prox*, está dada por,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para } \sigma > 0; \text{ encuentre } \boldsymbol{\xi} \in K_2 : \\ \boldsymbol{\xi} = \arg \left(\inf_{\boldsymbol{\delta} \in \mathcal{D}(\sigma\Phi^*)} \left\{ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\delta} - (\boldsymbol{\xi} + \sigma\mathbf{J}\boldsymbol{\alpha})\|_{\mathbf{W}}^2 + \sigma\Phi^*(\boldsymbol{\delta}) \right\} \right) \\ \qquad \qquad \qquad = \text{Prox}_{\sigma\Phi^*} [\boldsymbol{\xi} + \sigma\mathbf{J}\boldsymbol{\alpha}] = (\mathbf{I} - \text{Prox}_{\sigma\Phi \circ (1/\sigma)\mathbf{I}}) [\boldsymbol{\xi} + \sigma\mathbf{J}\boldsymbol{\alpha}] \end{array} \right. \quad (84)$$

Donde para obtener la última igualdad se emplea el resultado presentado en el Lema 3.

Para la solución de los sistemas anteriores (81 y 84) se procede de acuerdo con lo establecido en la sección 10 de este capítulo. Sólomente resta por explicitar el término $\text{Prox}_{\sigma\Phi \circ (1/\sigma)\mathbf{I}}$ de (84). Para lograr lo anterior supondremos que $\Phi^* = (I_{K_2})^*$, es decir que Φ^* es la polar de la funcional indicatriz I_{K_2} . Para caracterizar el anterior término de proximidad se emplea la definición de λ_{he}^* dada en (72) y la de Φ^* dada en (73), con lo que se obtiene que $\Phi^* : \Re^{r_h} \rightarrow \Re\{+\infty\}$ y que está definida por $\boldsymbol{\xi} \mapsto \Phi^*(\boldsymbol{\xi}) = \int_{\Omega} \phi^*[\mathbf{x}; \lambda_{he}^*(\mathbf{x})] d\Omega$; por lo que usando la regla del trapecio para aproximar a esta integral se tiene que,

$$\begin{aligned} \Phi^*(\boldsymbol{\xi}) &= \int_{\Omega} \phi^* \left[\mathbf{x}; \sum_{j=1}^{r_h} \xi_j \psi_j(\mathbf{x}) \right] d\Omega = \sum_{k=1}^{r_h} \int_{e_k} \phi^* \left[\mathbf{x}; \sum_{j=1}^{r_h} \xi_j \psi_j(\mathbf{x}) \right] de_k \\ &= \sum_{k=1}^{r_h} \frac{1}{3} \text{Área}(e_k) \{ \phi^*(\mathbf{x}_k^1; \xi_k) + \phi^*(\mathbf{x}_k^2; \xi_k) + \phi^*(\mathbf{x}_k^3; \xi_k) \} = (I_{K_2}(\boldsymbol{\xi}))^*. \end{aligned} \quad (85)$$

Donde $\{\mathbf{x}_k^1, \mathbf{x}_k^2, \mathbf{x}_k^3\}$ son los vértices del triángulo e_k y $\psi_k \in W_h$, ecuación (71). Si definimos a ϕ^* mediante,

$$\phi^*(\mathbf{x}; \cdot) = \begin{cases} c(\mathbf{x})\lambda^*(\mathbf{x}), & \text{si } \lambda^*(\mathbf{x}) \geq 0 \\ +\infty, & \text{si } \lambda^*(\mathbf{x}) < 0 \end{cases} \quad (86)$$

entonces ϕ^* modelará un problema de control, ya que su polar (vía la gráfica inversa (39), Lema 1) está dada por,

$$\phi(\mathbf{x}; \cdot) = \begin{cases} 0, & \text{si } c(\mathbf{x}) \leq \bar{c}(\mathbf{x}) \\ +\infty, & \text{si } c(\mathbf{x}) > \bar{c}(\mathbf{x}, t) \end{cases}$$

ver relación (62). Para la definición de ϕ^* dada en (86), la relación (85) se reduce a la siguiente expresión,

$$\Phi^*(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{k=1}^{r_h} \frac{1}{3} \text{Área}(e_k) \begin{cases} \tilde{c}(\tilde{\mathbf{x}}_k) \xi_k, & \text{si } \xi_k \geq 0 \\ +\infty, & \text{si } \xi_k < 0 \end{cases} = \sum_{k=1}^{r_h} \beta^*(\xi_k) = (I_{K_2}(\boldsymbol{\xi}))^* \quad (87)$$

Donde $\tilde{c}(\tilde{\mathbf{x}}_k) = \tilde{c}(\mathbf{x}_k^1 + \mathbf{x}_k^2 + \mathbf{x}_k^3) = c(\mathbf{x}_k^1) + c(\mathbf{x}_k^2) + c(\mathbf{x}_k^3)$ y $\beta^* : \Re \rightarrow \Re \cup \{+\infty\}$ esta definida por,

$$\xi_k = \beta^*(\xi_k) = \frac{1}{3} \text{Área}(e_k) \begin{cases} \tilde{c}(\tilde{\mathbf{x}}_k)\xi_k, & \text{si } \xi_k \geq 0 \\ +\infty, & \text{si } \xi_k < 0 \end{cases} \quad (88)$$

para $k = 1, \dots, r_h$. De este modo a partir de (87) y (88), la interpretación de Φ^* , dada en (85), es que Φ^* es la suma de sus componentes vectoriales, las cuales estan dadas por la imágen de las componentes de $\boldsymbol{\xi} \in \Re^{r_h}$ bajo la funcional convexa, propia y semicontinua inferiormente β^* . A partir de la definición de β^* y de la polar (relación (39) del Lema 1), se tiene que $\beta : \Re \rightarrow \Re \cup \{+\infty\}$, está definida por,

$$\beta(\eta_k) = I_{(-\infty, \frac{\tilde{c}(\tilde{\mathbf{x}}_k)}{3} \text{Área}(e_k)]}, \quad k = 1, \dots, r_h \quad (89)$$

De esta forma, la polar de Φ^* , $(\Phi^*)^* : \Re^{r_h} \rightarrow \Re \cup \{+\infty\}$, se puede expresar con el uso de (89) de la siguiente manera,

$$(\Phi^*)^*(\boldsymbol{\eta}) = \sum_{k=1}^{r_h} \beta(\eta_k). \quad (90)$$

Ya que $\sigma(\Phi^*)^* \circ \frac{1}{\sigma} I : \Re^{r_h} \rightarrow \Re \cup \{+\infty\}$, por lo que usando (89) y (90) se tiene que,

$$\boldsymbol{\eta} \mapsto \left[\sigma(\Phi^*)^* \circ \frac{1}{\sigma} I \right] (\boldsymbol{\eta}) = [\sigma(\Phi^*)^*] \frac{\boldsymbol{\eta}}{\sigma} = \sigma \sum_{k=1}^{r_h} \beta(\eta_k/\sigma) = \sum_{k=1}^{r_h} I_{(-\infty, \frac{\sigma \tilde{c}(\tilde{\mathbf{x}}_k)}{3} \text{Área}(e_k)]}. \quad (91)$$

Por lo que aplicando el resultado del Lema 3, se tiene que,

$$\text{Prox}_{\sigma\Phi^*} = \mathbf{I} - \text{Prox}_{\sigma(\Phi^*)^* \circ (1/\sigma)\mathbf{I}} = \mathbf{I} - \text{Proy}_{K_2} \quad (92)$$

donde K_2 es el convexo propio y cerrado que resulta del producto cartesiano definido por,

$$K_2 = \prod_{k=1}^{r_h} \left(-\infty, \frac{\sigma \tilde{c}(\tilde{\mathbf{x}}_k)}{3} \text{Área}(e_k) \right], \quad (93)$$

la componente k ésima de la proyección sobre K_2 esta dada por,

$$\{\text{Proy}_{K_2}(\boldsymbol{\eta})\}_k = \text{Proy}_{(-\infty, \frac{\sigma \tilde{c}(\tilde{\mathbf{x}}_k)}{3} \text{Área}(e_k)]}(\eta_k) \quad (94)$$

A partir del resultado (92), se tiene que el problema (84) queda expresado de la siguiente forma,

$$\begin{cases} \text{Para } \sigma > 0; \text{ encuentre } \boldsymbol{\xi} \in K_2 : \\ \boldsymbol{\xi} = [\boldsymbol{\xi} + \sigma \mathbf{J}\boldsymbol{\alpha}] - \text{Proy}_{K_2} [\boldsymbol{\xi} + \sigma \mathbf{J}\boldsymbol{\alpha}] \end{cases} \quad (95)$$

Como anotación final hay que señalar que (81) y (95) constituyen el fundamento, para definir los procedimientos iterativos de tipo Uzawa, para resolver los términos de proximidad resultantes en el problema de transporte advectivo dominante en los algoritmos primal (\mathbf{MTP}_h) y mixto de control interno dualizado (\mathbf{MTM}_h); las relaciones (81) y (95) permiten obtener las expresiones equivalentes a los algoritmos ($\widetilde{\mathbf{ALG}}_1$) – ($\widetilde{\mathbf{ALG}}_3$), determinados para el problema de flujo en velocidad y presión. En el siguiente capítulo se obtendrán expresión explícitas para los algoritmos iterativos de Uzawa correspondientes a (\mathbf{MTP}_h) y (\mathbf{MTM}_h) del ejemplo sintético del problema advectivo dominante analizado.

14 Resumen de la estrategia, acoplamiento e hipótesis de trabajo

Las ecuaciones que describen el balance de masa para el flujo inmiscible bifásico, relación (14), son transformadas mediante conceptos de flujo fraccional en su formulación de tipo presión-saturación en las ecuaciones para la presión (23) y la igualdad para la saturación (24). La ecuación (24) se resuelve para la saturación S_w (la saturación no mojante S_a , se determina mediante (15)), al sustituirla en la relación (23)₁ se resuelve para la velocidad \mathbf{u} , y mediante (23)₂ se resuelve para la presión p .

En el capítulo anterior se determina que las relaciones para la presión (23) tienen la misma forma que las (13) y (7)₂, respectivamente; y que la relación para la saturación (24) tiene las mismas características formales que la ecuación para la concentración (10). Finalmente las relaciones prototipo para las que se presenta solución en éste trabajo están dadas en (47) y (60) para la velocidad-presión y concentración, respectivamente. En la Tabla 1 se resume lo anteriormente indicado.

Balance Bifásico	Flujo Fraccional	Equivalencias Monofásicas	Ecuaciones Prototipo
Ec. (14)	Ec. (23)	Ec. (13) y Ec. (7) ₂	Ec. (47)
	Ec. (24)	Ec. (10)	Ec. (60)

Tabla 1. Equivalencias entre el balance bifásico y ecuaciones prototipo.

Finalmente en las secciones 12 y 13 se indican las hipótesis de trabajo empleadas para establecer las relaciones prototipo (47) y (60) resueltas en éste trabajo.

Capítulo IV

Resultados numéricos en el problema de transporte

15 Introducción

Se presenta un ejemplo hipotético y los resultados numéricos obtenidos, que prueban el adecuado comportamiento del procedimiento propuesto, para la solución del problema de transporte advectivo dominante. También se presentan los aspectos relevantes de la implementación numérica, en Fortran 77, de los algoritmos propuestos.

16 Problema de transporte advectivo dominante

Se considera un problema transporte, ver relaciones 3(60-62), que nos permite probar el procedimiento desarrollado bajo situaciones advectivo dominantes, es decir para números grandes de Péclet, ecuación 3(75); más aún, el ejemplo que se propone permite también analizar el problema de control de contaminantes, es decir los casos en los que el nivel de concentración c de un determinado soluto no exceda cierto valor máximo, dado por una cota establecida por los requisitos de calidad del agua. Por ejemplo el límite permisible para el arsénico es de $\bar{c} = 0.05 \text{ mg/l}$ y de $\bar{c} = 250 \text{ mg/l}$ para los cloruros, en el agua destinada al consumo humano (NOM-127-SSA1, 1994). Se propone un acuífero de área $\Omega \text{ m}^2$ del tipo homogéneo e isótropo con velocidad promedio horizontal \mathbf{u} , y se plantea el siguiente problema de transporte y de control (ADC),

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre la función de concentración } c \text{ que satisfice:} \\ \frac{\partial c}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \text{div}[k\mathbf{I}\nabla c(\mathbf{x}, t)] + \mathbf{w}\mathbf{e}_x \cdot \nabla c(\mathbf{x}, t) + dc(\mathbf{x}, t) - f = f_c(\mathbf{x}, t; c(\mathbf{x}, t)), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \\ c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \\ \gamma c(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, T) \\ \text{con la restricción interna (requisito de calidad del agua): } c(\mathbf{x}, t) \leq \bar{c}(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T) \end{array} \right. \quad (96)$$

En donde Ω es una región acotada de \Re^2 y $(0, T) \subset \Re$ es el intervalo de tiempo de estudio. El área Ω y los coeficientes especificados en el problema anterior (96) están definidos de la siguiente manera,

$$\left. \begin{aligned} \Omega &= \{(0, 3) \times (0, 2)\} - \{(0, 1) \times (0, 1)\} \\ \mathbf{D}(\mathbf{x}) &= k\mathbf{I}, \quad \mathbf{u}(x, t) = w\mathbf{e}_x = w(1, 0) \\ d(\mathbf{x}) &= d, \quad f(\mathbf{x}, t) = f \end{aligned} \right\} \quad (97)$$

donde k , w , d y f son constantes, la condición de frontera es de tipo Dirichlet homogénea. El campo incógnita c debe satisfacer también ser menor o igual a la restricción interna \bar{c} en cada punto de $\Omega \times (0, T)$. El campo de velocidades indicado en la anterior relación (97) es idóneo para analizar el comportamiento hiperbólico-parabólico del problema de transporte, es decir las situaciones advectivo dominantes del problema ADC propuesto, lo que se logra variando apropiadamente las constantes k y w (Martínez Nájera, 2002).

Siguiendo la metodología propuesta en el capítulo anterior, la restricción interna (\bar{c}) se caracteriza por el dominio efectivo de la siguiente funcional (y subdiferencial) convexa, propia y semicontinua inferiormente ϕ , relación 3(41),

$$\phi(\mathbf{x}, t; \cdot) = \begin{cases} 0, & c(\mathbf{x}, t) \leq \bar{c}(\mathbf{x}, t) \\ +\infty, & c(\mathbf{x}, t) > \bar{c}(\mathbf{x}, t) \end{cases} ; \quad \partial\phi(\mathbf{x}, t; \cdot) = \begin{cases} \{0\}, & c(\mathbf{x}, t) < \bar{c}(\mathbf{x}, t) \\ [0, +\infty), & c(\mathbf{x}, t) = \bar{c}(\mathbf{x}, t) \\ \emptyset, & c(\mathbf{x}, t) > \bar{c}(\mathbf{x}, t) \end{cases} \quad (98)$$

Vía la gráfica inversa, refiérase al 3(Lema 1) y relación 3(39), la polar y subdiferencial de ϕ están dados por la siguiente expresión,

$$\phi^*(\mathbf{x}, t; \cdot) = \begin{cases} c(\mathbf{x}, t)\lambda^*(\mathbf{x}, t), & \lambda^*(\mathbf{x}, t) \geq 0 \\ +\infty, & \lambda^*(\mathbf{x}, t) < 0 \end{cases} ; \quad \partial\phi^*(\mathbf{x}, t; \cdot) = \begin{cases} (-\infty, c(\mathbf{x}, t)], & \lambda^*(\mathbf{x}, t) = 0 \\ \{c(\mathbf{x}, t)\}, & \lambda^*(\mathbf{x}, t) > 0 \\ \emptyset, & \lambda^*(\mathbf{x}, t) < 0 \end{cases} \quad (99)$$

De 3(67) y (97) los campos duales λ^* y μ^* están dados de la siguiente forma,

$$\left\{ \begin{aligned} \lambda^*(\mathbf{x}, t) &= -\frac{\partial c}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \text{div}[k\mathbf{I}\nabla c(\mathbf{x}, t)] - w(1, 0) \cdot \nabla c(\mathbf{x}, t) - dc(\mathbf{x}, t) + f, & (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T), \\ \mu^*(\mathbf{x}, t) &= -k\mathbf{I}\nabla c(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, T). \end{aligned} \right. \quad (100)$$

Por su parte, la condición de frontera Dirichlet (96)₃ se caracteriza por el dominio efectivo de la funcional convexa, propia y semicontinua inferiormente ψ ,

$$\psi(\mathbf{x}, t; \cdot) = \begin{cases} 0, & \gamma c(\mathbf{x}, t) = 0 \\ +\infty, & \gamma c(\mathbf{x}, t) \neq 0 \end{cases} ; \quad \partial\psi(\mathbf{x}, t; \cdot) = \begin{cases} (-\infty, +\infty), & \gamma c(\mathbf{x}, t) = 0 \\ \emptyset, & \gamma c(\mathbf{x}, t) \neq 0 \end{cases} \quad (101)$$

mientras que la polar y subdiferencial polar de ψ son los siguientes,

$$\psi^*(\mathbf{x}, t; \cdot) = 0, \quad \partial\psi^*(\mathbf{x}, t; \cdot) = \{0\}, \quad \forall \mu^*(\mathbf{x}, t) \in \mathfrak{R} \quad (102)$$

El algoritmo primal, 3(MTP_h) determina la solución para el campo de concentración c , es decir (96)₁; mientras que el mixto de control interno dualizado 3(MTM_h), calcula las magnitudes del campo dual que obliga a que la solución para la concentración satisfaga tanto el balance de masa 3(60) como las condiciones inicial, a la frontera y restricciones reguladoras expresadas en 3(61-62), es decir (96)₁₋₄. Mediante el uso de (98-99 y 101-102) se explicita de manera numérica la solución del problema planteado en (96 y 97). La restricción interna es caracterizada por (98) y la condición de frontera Dirichlet homogénea por (101).

Para obtener las versiones numéricas de los algoritmos primal y mixto de control interno dualizado se tienen los siguientes aspectos. Primeramente, se tiene para los espacios V_h y W_h especificados en 3(71) lo siguiente,

$$\begin{cases} m_h = \text{número total de vértices internos} \\ r_h = \text{número total de elementos triangulares} \end{cases} \quad (103)$$

Para una triangulación \mathcal{T}^h de Ω , y ya que el grado de libertad en el que se está interesado es el valor de la incógnita en cada vértice interno, entonces una definición apropiada para V_h y W_h es la siguiente,

$$\begin{cases} V_h = \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}) : v_h|_{e_i} \in \mathcal{P}_{\leq 1}(e_i), \quad i = 1, \dots, r_h\} \\ W_h = \{w_h \in L^2(\bar{\Omega}) : w_h|_{e_i} \in \mathcal{P}_{=0}(e_i), \quad i = 1, \dots, r_h\} \end{cases} \quad (104)$$

donde $\mathcal{P}_{\leq k}$ son los polinomios de grado menor o igual que k . De este modo las funciones base para V_h y W_h están dadas por la siguiente expresión,

$$\begin{cases} \varphi_i(P_j) = \delta_{ij}, & i, j = 1, \dots, m_h \\ \psi_s(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{si } \mathbf{x} \in e_s \\ 0, & \text{si } \mathbf{x} \notin e_s \end{cases}, & s = 1, \dots, r_h \end{cases} \quad (105)$$

Donde $\{P_j\}_{j=1}^{m_h} \subset \Omega$ son los vértices internos de una partición de Ω .

Usando las relaciones anteriores, la desigualdad 3(MTP_h) para el algoritmo primal, se reduce a la siguiente expresión,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } f \in L^2(0, T; L^2(\Omega)), \text{ encuentre } \{\boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})\}_{n=0}^{N_{\Delta t}} \subset K^{m_h}(t^{n+\theta}) : \\ \mathbf{F}\boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta}) \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})\} \geq \{\mathbf{G}\boldsymbol{\alpha}(t^n) + \mathbf{f}\} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})\}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K^{m_h}(t^{n+\theta}) \\ \text{con } \quad \alpha_j(0) = c_{0h}(P_j), \quad j = 1, \dots, m_h, \quad P_j \in \Omega \end{array} \right. \quad (106)$$

Por su parte, la relación 3(MTM_h) para el algoritmo mixto de control interno dualizado queda expresado por la siguiente relación,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } \{(\boldsymbol{\alpha}(t^n), \boldsymbol{\xi}(t^n))\}_{n=0}^{N_{\Delta t}} \subset J^{m_h}(t^n) \times \mathfrak{R}^{r_h} : \\ \mathbf{H}\boldsymbol{\alpha}(t^{n+1}) \cdot \boldsymbol{\beta} = \mathbf{L}\boldsymbol{\alpha}(t^n) \cdot \boldsymbol{\beta} + \mathbf{g}(t^n) \cdot \boldsymbol{\beta} + \theta \mathbf{E}\boldsymbol{\xi}(t^{n+1}) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K_{0h}^{m_h}(t^n) \\ \text{con } \quad \alpha_j(0) = c_{0h}(P_j), \quad j = 1, \dots, m_h, \quad P_j \in \Omega \\ \boldsymbol{\Phi}^*(t^{n+1}; \boldsymbol{\delta}) - \boldsymbol{\Phi}^*(t^{n+1}; \boldsymbol{\xi}(t^{n+1})) \geq \mathbf{E}^T \boldsymbol{\alpha}(t^{n+1}) \cdot \{\boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{\xi}(t^{n+1})\}, \quad \forall \boldsymbol{\delta} \in \mathfrak{R}^{r_h} \end{array} \right. \quad (107)$$

Donde,

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F} = \frac{\mathbf{A}}{\theta \Delta t} + \mathbf{B} + \overline{\mathbf{C}} + \mathbf{D}, \quad \mathbf{G} = \frac{\mathbf{A}}{\theta \Delta t} \\ \mathbf{H} = \frac{\mathbf{A}}{\Delta t} + \theta [\mathbf{B} + \overline{\mathbf{C}} + \mathbf{D}], \quad \mathbf{L} = \frac{\mathbf{A}}{\Delta t} - (1 - \theta) [\mathbf{B} + \overline{\mathbf{C}} + \mathbf{D}], \quad \mathbf{g}(t^n) = \mathbf{f} - (1 - \theta) \mathbf{E}\boldsymbol{\xi}(t^n) \end{array} \right. \quad (108)$$

La relación (106) es resuelta mediante un método iterativo de tipo Uzawa; para lo cual tomamos un contador entero p de iteraciones, y haciendo uso del resultado expresado en 3(81) se obtiene que (106) se transforma en la siguiente expresión,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } f \in L^2(0, T; L^2(\Omega)), \text{ encuentre } \{\boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})\}_{n=0}^{N_{\Delta t}} \subset K^{m_h}(t^{n+\theta}) : \\ [\boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})]^{p+1} = \text{Proy}_{K_1} \{ [\boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})]^p - \rho \{ [\mathbf{F}\boldsymbol{\alpha}(t^{n+\theta})]^p - \mathbf{G}\boldsymbol{\alpha}(t^n) - \mathbf{f} \} \} \\ \text{con } \quad \alpha_j(0) = c_{0h}(P_j), \quad j = 1, \dots, m_h, \quad P_j \in \Omega \end{array} \right. \quad (\widetilde{\text{MTP}}_h)$$

en donde,

$$K_1 = \prod_{k=1}^{m_h} (-\infty, c(P_k, t^{n+\theta})] \quad (109)$$

Por su parte, las relaciones (107) forman un sistema acoplado y, nuevamente, su solución es por un método iterativo Uzawa. Usando el resultado 3(95) y mediante el uso de un contador p se obtiene la siguiente expresión para (107) en términos de operadores de proyección,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } \{(\boldsymbol{\alpha}(t^n), \boldsymbol{\xi}(t^n))\}_{n=0}^{N_{\Delta t}} \subset J^{m_h}(t^n) \times \mathfrak{R}^{r_h} : \\ [\mathbf{H}\boldsymbol{\alpha}(t^{n+1})]^p \cdot \boldsymbol{\beta} = \mathbf{L}\boldsymbol{\alpha}(t^n) \cdot \boldsymbol{\beta} + \mathbf{g}(t^n) \cdot \boldsymbol{\beta} + \theta [\mathbf{E}\boldsymbol{\xi}(t^{n+1})]^p \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K_{0h}^{m_h}(t^n) \\ [\boldsymbol{\xi}(t^{n+1})]^{p+1} = \{[\boldsymbol{\xi}(t^{n+1})]^p + \sigma [\mathbf{E}^T \boldsymbol{\alpha}(t^{n+1})]^p\} - \text{Proy}_{K_2} \{[\boldsymbol{\xi}(t^{n+1})]^p + \sigma [\mathbf{E}^T \boldsymbol{\alpha}(t^{n+1})]^p\} \\ \text{con } \alpha_j(0) = c_{0h}(P_j), \quad j = 1, \dots, m_h, \quad P_j \in \Omega \end{array} \right. \quad (\widetilde{\text{MTM}}_h)$$

donde K_2 esta definido como en 3(93),

$$K_2 = \prod_{k=1}^{r_h} \left(-\infty, \frac{\sigma \tilde{c}(\tilde{\mathbf{x}}_k)}{3} \text{Área}(e_k) \right].$$

Las entradas explícitas de las matrices y vectores participantes en (106, 107 y 108) son las siguientes,

$$\left. \begin{array}{l} A_{i,i} = \frac{h^2}{2}, \quad A_{i,i+1} = A_{i,i+\eta} = A_{i,i+\eta-1} = \frac{h^2}{12} \\ B_{i,i} = 4k, \quad B_{i,i+1} = B_{i,i+\eta} = -k, \quad B_{i,i+\eta-1} = 0 \\ \bar{C}_{i,i} = hw\varepsilon \{H(hw) - H(-hw)\}, \quad \bar{C}_{i,i+1} = hw \left\{ \varepsilon [1 - H(hw)] + \frac{1}{2}(1 - \varepsilon) \right\} \\ \bar{C}_{i,i-1} = -hw \left\{ \varepsilon [1 - H(-hw)] + \frac{1}{2}(1 - \varepsilon) \right\}, \quad \varepsilon = \text{máx} \left\{ 0, 1 - \frac{2k}{hw} \right\} \\ D_{i,i} = \frac{dh^2}{2}, \quad D_{i,i+1} = D_{i,i+\eta} = D_{i,i+\eta-1} = \frac{dh^2}{12} \\ E_{i,j} = \frac{h^2}{6}, \quad \bar{\Omega}_j^e \subset \Omega_i \\ f_i = fh^2 \\ \text{con } \quad i = 1, \dots, m_h, \quad j = 1, \dots, r_h \end{array} \right\} \quad (110)$$

Donde Ω_i es el dominio consistente asociado al vértice P_i ; mientras que $\bar{\Omega}_j^e$ es un elemento de la subdivisión consistente de Ω_i . Las relaciones anteriores (110) se determinan a partir de las relaciones 3(72) y 3(73), con el empleo de dominios consistentes, sobre los que se efectúa la cuadratura de las matrices y vectores. El parámetro η depende de m ($= 1/h$, siendo h el lado de longitud mínima de los triángulos de una partición regular y débilmente agua de tipo Friedrichs-Keller para la región de interés Ω), así como de las regiones $\Omega^1 = \{(1, 3) \times (0, 1)\}$ y $\Omega^2 = \{(0, 3) \times (1, 2)\}$ de Ω ($= \Omega^1 \cup \Omega^2$), de tal forma que cuando el vértice está en Ω^1 se tiene que $\eta = 2m - 1$ y cuando está en Ω^2 se tiene que $\eta = 3m - 1$. Recordamos también que $H(\cdot)$ es la función de Heaviside. El procedimiento de solución numérica es implementado en Fortran 77, Martínez Nájera (2002), en la siguiente sección se presentan los programas elaborados.

Los resultados numéricos del problema prototipo (96-97) están dados en (106), (107), ($\widetilde{\mathbf{MTP}}_{\mathbf{h}}$), ($\widetilde{\mathbf{MTM}}_{\mathbf{h}}$) y (110); se comparan con la solución analítica del problema advectivo dominante de valores inicial y a la frontera sin control (ADS) asociado a (96 y 97). Cuando $t \rightarrow \infty$, la solución analítica de (96-97) está dada de la siguiente forma,

$$c(\mathbf{x}, \infty) = \begin{cases} x, & (x, \infty) \in (0, 3) \times (1, 2) \\ x - 1, & (x, \infty) \in (1, 3) \times (0, 1) \end{cases} \quad (111)$$

La relación anterior es discontinua sobre las líneas $(1, 3) \times \{1\}$ y $\{3\} \times (0, 2)$ y mantiene frentes abruptos sobre la frontera $\partial\Omega$ de Ω . Un aspecto de importancia de (111) es que el máximo de c , cuando $t \rightarrow \infty$, es 3 mg/m^3 .

16.1 Código de la implementación numérica del problema de transporte

Se presenta el programa elaborado en Fortran 77 para implementar numéricamente la solución del problema de transporte.

```
C**** PRO.FOR ****
C*** Programa principal. Genera las entradas de las matrices: A de masa, B
C*** de difusión, C del término advectivo, E de acoplamiento, D de fuente y
C*** vector f de fuente. El programa hace la llamada a las soluciones de
C*** los problemas primal y mixto de control interno dualizado.
C*** Significado de las variables: m es el parámetro de partición del domi-
C*** nio, w la magnitud de velocidad horizontal, k coeficiente de difusión
C*** d el coeficiente de absorción cinética irreversible de primer orden, f
C*** el término de fuente/sumidero para el contaminante y c la magitud de
C*** la restricción para la concentración; teta el parámetro de partición
C*** temporal y deltaTN el tiempo total de estudio del problema transitorio.

PROGRAM PRINCIPAL
implicit real*8 (a-h,o-z)
common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
common /vertices/vert(101,2),bari(250,2)
write(6,*)"Dame m ..."
read(5,*)m
write(6,*)"Dame w, k, d, f y especifica a c ..."
read(5,*)w,xk,xd,xf
write(6,*)"Dame teta y el tiempo total de evolucion ..."
```

```

read(5,*)teta,deltaTN
call gdeltaT(m,xk,w,teta,deltaT)
call genCup(m,w,xk)
call genBD(m,xk,xd)
call genA(m)
call genf(m,xf)
call genFG(m,teta,deltaT)
call gevert(m)
call primal(m,deltaT,deltaTN,teta)
call mixto(m,teta,deltaT,deltaTN)
STOP
END

```

C**** PRI.FOR *****

C*** Subrutina que resuelve el problema primal.

```

SUBROUTINE primal(m,deltaT,deltaTN,teta)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
common /vertices/vert(101,2),bari(250,2)
dimension s1(101),s2(101),s3(101)
delta=deltaT
call condini(m,s1)
call imps1(0.d0,m,s1)
iimp=0
do while ( delta .le. deltaTN )
    iimp=iimp+1
    call prodGaFa(m,0,s1,s2)
    call sumavec1(m,f,s2,s3)
    call UZAWA1(m,teta,delta,s1,s2,s3)
    if ( iimp .eq. 10 ) then
        call imps1(delta,m,s1)
        iimp=0
    endif
    delta=delta+deltaT
enddo
RETURN
END

```

```
C**** MIX.FOR *****
```

```
C*** Subrutina de solución del problema mixto de control interno dualizado.
```

```
  SUBROUTINE mixto(m,teta,deltaT,deltaTN)
  implicit real*8 (a-h,o-z)
  common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
  common /vertices/vert(101,2),bari(250,2)
  dimension s1(101),s2(250),s3(250),s4(250),s5(101),s6(101),
* s7(101),s8(101),Aaux(101,29)
  delta=deltaT
  call condini(m,s1)
  call condiniD(m,s2)
  call imps1(0.d0,m,s1)
  call imps2(0.d0,m,s2)
  k=(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
  k1=6*m-1
  k2=3*m
  iimp=0
  do i=1,k
    do j=1,k1
      Aaux(i,j)=A(i,j)
    enddo
  enddo
  call BDFAC(k,k2,k1,Aaux)
  do while (delta .le. deltaTN)
    iimp=iimp+1
    call prodGaFa(m,0,s1,s5)
    call sumavec1(m,f,s5,s6)
    call prodEx(m,teta,s2,s7)
    call sumavec2(m,s6,s7,s8)
    call BDSOL(k,k2,k1,Aaux,s8)
    call UZAWA2(m,teta,delta,s1,s2,s8)
    if (iimp .eq. 10) then
      call imps1(delta,m,s1)
      call imps2(delta,m,s2)
      iimp=0
    endif
  enddo
```

```

        delta=delta+deltaT
    enddo
RETURN
END

C**** UZ1.FOR ****
C*** Subrutina para resolver desigualdades variacionales del primer tipo
C*** mediante procedimientos de tipo Uzawa.
SUBROUTINE UZAWA1(m,teta,delta,s1,s2,s3)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
    common /vertices/vert(101,2),bari(250,2)
    dimension s1(101),s2(101),s3(101),s4(101)
    k=(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
    roo=0.4d0
    error=100.d0
    do i=1,k
        s4(i)=s1(i)
    enddo
    do while (error .ge. 0.01d0)
        error=0.d0
        call prodGaFa(m,1,s1,s2)
        do i=1,k
            s2(i)=s1(i)-roo*( s2(i)-s3(i) )
            xycontrol = xc( vert(i,1),vert(i,2) )
            if (s2(i) .gt. xycontrol) then
                s2(i)=xycontrol
            endif
            error=error+( s1(i)-s2(i) )**2
            s1(i)=s2(i)
        enddo
        error=error**0.5d0
    enddo
    do i=1,k
        s1(i)=( s1(i)-s4(i) )/teta + s4(i)
    enddo
RETURN

```

END

C**** UZ2.FOR ****

C*** Subrutina para resolver desigualdades variacionales del segundo tipo

C*** mediante procedimientos de tipo Uzawa.

SUBROUTINE UZAWA2(m,teta,delta,s1,s2,s8)

implicit real*8 (a-h,o-z)

common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)

common /vertices/vert(101,2),bari(250,2)

dimension s1(101),s2(250),s8(101),s3(101),s4(250),s5(250),s6(250)

k1=(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m

k=10*m*m

area=(1.d0/dble(m)**2)/2.d0

roo=0.4d0

error=100.d0

C**** Definir el valor de la fn. control cte.

XXCC=3.d0

call prodETx(m,teta,s1,s5)

do i=1,k

 s5(i)=roo*s5(i)

 s4(i)=s2(i)

enddo

do while (error .ge. 0.01d0)

 error=0.d0

 do i=1,k

 s6(i)=s2(i)+s5(i)

 xycontrol = roo*XXCC*area

 if (s6(i) .gt. xycontrol) then

 s6(i)=s6(i)-xycontrol

 else

 s6(i)=0

 endif

 error=error+(s2(i)-s6(i))**2

 s2(i)=s6(i)

 enddo

 error=error**0.5d0

enddo

```

do i=1,k
  s2(i)=( s2(i)-s4(i) )/teta + s4(i)
enddo
do i=1,k1
  s1(i)=( s8(i)-s1(i) )/teta + s1(i)
enddo
RETURN
END

```

C**** INI.FOR *****

C*** Subrutina para especificar las condiciones iniciales del campo primal.

```

SUBROUTINE condini(m,xsal)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common /vertices/vert(101,2),bari(250,2)
dimension xsal(101)

```

C*** Función condición inicial especificarla; se supone el siguiente valor:

```

u(x,y)=0.d0
do i=1,(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
  xsal(i)=u( vert(i,1),vert(i,2) )
enddo
RETURN
END

```

C*** Subrutina para especificar las condiciones iniciales del campo dual.

```

SUBROUTINE condiniD(m,xsal)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common /vertices/vert(101,2),bari(250,2)
dimension xsal(250)

```

C*** Función condición inicial dual especificarla; se supone el valor:

```

du(x,y)=0.d0
do i=1,10*m*m
  xsal(i)=du( bari(i,1),bari(i,2) )
enddo
RETURN
END

```

C*** Función para especificar las restricciones internas.

```

real*8 FUNCTION xc(x,y)

```

```

    real*8 x,y
C*** Función control interno especificarla; se supone el siguiente valor:
    xc=5.d0
    RETURN
    END

C*** Subrutina para especificar el tamaño de paso en el tiempo.
    SUBROUTINE gdeltaT(m,xk,w,teta,deltaT)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    h=1.d0/dble(m)
    deltaT=(h**2)/( 4.d0*(1.d0-teta)*(xk+h*dabs(w)) )
    RETURN
    END

C**** GEA.FOR *****
C*** Subrutina para generar la matriz A de masa.
    SUBROUTINE genA(m)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
    h=( 1.d0/dble(m) )**2
    n=3*m
    do i=1,(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
        A(i,n)=h
    enddo
    RETURN
    END

C**** GBD.FOR *****
C*** Subrutina para generar las matrices B (de difusión) y D (de fuente).
    SUBROUTINE genBD(m,xk,xd)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
    h5=xk*4.d0
    h6=-xk
    h7=xd*( (1.d0/dble(m))**2 )/2.d0
    h8=xd*( (1.d0/dble(m))**2 )/12.d0
    k=3*m-1
    k1=3*m-3

```

```

k2=m-2
k3=3*m-2
k4=2*m-1
k5=2*m-3
k6=5*m-2
k7=m-1
n=3*m
n1=2*n-1
n2=2*n-2
n3=n+1
n4=n-1
n5=m+1
n6=m+2
n7=5*m-1
n8=5*m-2
B(1,n)=h5
B(1,n3)=h6
B(1,n1)=h6
D(1,n)=h7
D(1,n3)=h8
D(1,n1)=h8
do i=2,k3
    B(i,n)=h5
    B(i,n3)=h6
    B(i,n4)=h6
    B(i,n1)=h6
    D(i,n)=h7
    D(i,n3)=h8
    D(i,n4)=h8
    D(i,n1)=h8
    D(i,n2)=h8
enddo
B(k,n)=h5
B(k,n4)=h6
B(k,n1)=h6
D(k,n)=h7

```

```

D(k,n4)=h8
D(k,n1)=h8
D(k,n2)=h8
do i1=k+1,k*2,k
  B(i1,n)=h5
  B(i1,n3)=h6
  B(i1,n1)=h6
  B(i1,1)=h6
  D(i1,n)=h7
  D(i1,n3)=h8
  D(i1,n1)=h8
  D(i1,1)=h8
  D(i1,2)=h8
do i=i1+1,i1+k1
  B(i,n)=h5
  B(i,n3)=h6
  B(i,n4)=h6
  B(i,n1)=h6
  B(i,1)=h6
  D(i,n)=h7
  D(i,n3)=h8
  D(i,n4)=h8
  D(i,n1)=h8
  D(i,n2)=h8
  D(i,1)=h8
  D(i,2)=h8
enddo
i=i1+k1+1
B(i,n)=h5
B(i,n4)=h6
B(i,n1)=h6
B(i,1)=h6
D(i,n)=h7
D(i,n4)=h8
D(i,n1)=h8
D(i,n2)=h8

```

```

    D(i,1)=h8
enddo
j=k*k2+1
B(j,n)=h5
B(j,n3)=h6
B(j,1)=h6
D(j,n)=h7
D(j,n3)=h8
D(j,1)=h8
D(j,2)=h8
do i=j+1,j+m-1
    B(i,n)=h5
    B(i,n3)=h6
    B(i,n4)=h6
    B(i,1)=h6
    D(i,n)=h7
    D(i,n3)=h8
    D(i,n4)=h8
    D(i,1)=h8
    D(i,2)=h8
enddo
j=k*k2+m+1
B(j,n)=h5
B(j,n3)=h6
B(j,n4)=h6
B(j,1)=h6
B(j,n7)=h6
D(j,n)=h7
D(j,n3)=h8
D(j,n4)=h8
D(j,1)=h8
D(j,2)=h8
D(j,n7)=h8
do i=j+1,k*k7-1
    B(i,n)=h5
    B(i,n3)=h6

```

```

    B(i,n4)=h6
    B(i,1)=h6
    B(i,n7)=h6
    D(i,n)=h7
    D(i,n3)=h8
    D(i,n4)=h8
    D(i,1)=h8
    D(i,2)=h8
    D(i,n7)=h8
    D(i,n8)=h8
enddo
j=k*k7
B(j,n)=h5
B(j,n4)=h6
B(j,1)=h6
B(j,n7)=h6
D(j,n)=h7
D(j,n4)=h8
D(j,1)=h8
D(j,n7)=h8
D(j,n8)=h8
do i1=j+1,k6*k7,k4
    B(i1,n)=h5
    B(i1,n3)=h6
    B(i1,n7)=h6
    B(i1,n5)=h6
    D(i1,n)=h7
    D(i1,n3)=h8
    D(i1,n7)=h8
    D(i1,n5)=h8
    D(i1,n6)=h8
do i=i1+1,i1+k5
    B(i,n)=h5
    B(i,n3)=h6
    B(i,n4)=h6
    B(i,n7)=h6

```

```

        B(i,n5)=h6
        D(i,n)=h7
        D(i,n3)=h8
        D(i,n4)=h8
        D(i,n7)=h8
        D(i,n8)=h8
        D(i,n5)=h8
        D(i,n6)=h8
    enddo
    i=i1+k5+1
    B(i,n)=h5
    B(i,n4)=h6
    B(i,n7)=h6
    B(i,n5)=h6
    D(i,n)=h7
    D(i,n4)=h8
    D(i,n7)=h8
    D(i,n8)=h8
    D(i,n5)=h8
enddo
j=k6*k7+1
B(j,n)=h5
B(j,n3)=h6
B(j,n5)=h6
D(j,n)=h7
D(j,n3)=h8
D(j,n5)=h8
D(j,n6)=h8
do i=j+1,k*k7+k4*m-1
    B(i,n)=h5
    B(i,n3)=h6
    B(i,n4)=h6
    B(i,n5)=h6
    D(i,n)=h7
    D(i,n3)=h8
    D(i,n4)=h8

```

```

        D(i,n5)=h8
        D(i,n6)=h8
    enddo
    j=k*k7+k4*m
    B(j,n)=h5
    B(j,n4)=h6
    B(j,n5)=h6
    D(j,n)=h7
    D(j,n4)=h8
    D(j,n5)=h8
    RETURN
END

```

C**** GEC.FOR *****

C*** Subrutina para generar las entradas de la matriz **C** (término advectivo)

C*** con upwind parcial.

```

SUBROUTINE genCup(m,w,xk)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
    h=1.d0/dbl(m)
    hw=h*w
    k=3*m-1
    k1=3*m-3
    k2=m-2
    k3=3*m-2
    k4=2*m-1
    k5=2*m-3
    k6=5*m-2
    k7=m-1
    n=3*m
    n3=n+1
    n4=n-1
    beta=1.d0-(2.d0*xk)/hw
    if ( beta .le. 0.d0 ) then
        beta=0.d0
    endif
    if (hw .gt. 0.d0) then

```

```

    Heav1=1.d0
    Heav2=0.d0
else
    Heav1=0.d0
    Heav2=1.d0
endif
Cii=hw*beta*( Heav1-Heav2 )
Cimas=hw*( beta*(1.d0-Heav1) + (1.d0-beta)/2.d0 )
Cimen=-hw*( beta*(1.d0-Heav2) + (1.d0-beta)/2.d0 )
C(1,n)=Cii
C(1,n3)=Cimas
do i=2,k3
    C(i,n)=Cii
    C(i,n3)=Cimas
    C(i,n4)=Cimen
enddo
C(k,n)=Cii
C(k,n4)=Cimen
do i1=k+1,k*k2,k
    C(i1,n)=Cii
    C(i1,n3)=Cimas
    do i=i1+1,i1+k1
        C(i,n)=Cii
        C(i,n3)=Cimas
        C(i,n4)=Cimen
    enddo
    i=i1+k1+1
    C(i,n)=Cii
    C(i,n4)=Cimen
enddo
j=k*k2+1
C(j,n)=Cii
C(j,n3)=Cimas
do i=j+1,j+m-1
    C(i,n)=Cii
    C(i,n3)=Cimas

```

```

    C(i,n4)=Cimen
enddo
j=k*k2+m+1
C(j,n)=Cii
C(j,n3)=Cimas
C(j,n4)=Cimen
do i=j+1,k*k7-1
    C(i,n)=Cii
    C(i,n3)=Cimas
    C(i,n4)=Cimen
enddo
j=k*k7
C(j,n)=Cii
C(j,n4)=Cimen
do i1=j+1,k6*k7,k4
    C(i1,n)=Cii
    C(i1,n3)=Cimas
    do i=i1+1,i1+k5
        C(i,n)=Cii
        C(i,n3)=Cimas
        C(i,n4)=Cimen
    enddo
    i=i1+k5+1
    C(i,n)=Cii
    C(i1,n4)=Cimen
enddo
j=k6*k7+1
C(j,n)=Cii
C(j,n3)=Cimas
do i=j+1,k*k7+k4*m-1
    C(i,n)=Cii
    C(i,n3)=Cimas
    C(i,n4)=Cimen
enddo
j=k*k7+k4*m
C(j,n)=Cii

```

```

C(j,n4)=Cimen
RETURN
END

```

```

C**** GEF.FOR *****

```

```

C*** Subrutina para generar el término de fuente f.

```

```

SUBROUTINE genf(m,xf)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
h=xf*( 1.d0/dble(m))**2 )
do i=1,(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
    f(i)=h
enddo
RETURN
END

```

```

C**** GFG.FOR *****

```

```

C*** Subrutina para generar las matrices compuestas F y G.

```

```

SUBROUTINE genFG(m,teta,deltaT)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
do i=1,(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
    do j=1,6*m-1
        aux=A(i,j)/(deltaT*teta)
        A(i,j)=aux+B(i,j)+C(i,j)+D(i,j)
        B(i,j)=aux
    enddo
enddo
RETURN
END

```

```

C**** VER.FOR *****

```

```

C*** Subrutina para generar los vértices y baricentros para una partición

```

```

C*** m, débilmente aguda del dominio de estudio oomega.

```

```

SUBROUTINE gevert(m)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common /vertices/vert(101,2),bari(250,2)
am=1.d0/dble(m)

```

```

k=0
C**** Vértices internos.
do i=1,m-1
  ym=2.d0-am*double(i)
  do j=1,3*m-1
    k=k+1
    vert(k,1)=am*double(j)
    vert(k,2)=ym
  enddo
enddo
do i=1,m
  ym=1.d0-am*double(i-1)
  do j=1,2*m-1
    k=k+1
    vert(k,1)=1.d0+am*double(j)
    vert(k,2)=ym
  enddo
enddo
C**** Baricentros.
am1=am/3.d0
am2=2.d0*am/3.d0
bari(1,1)=vert(1,1)-am2
bari(1,2)=vert(1,2)+am1
bari(2,1)=vert(1,1)-am1
bari(2,2)=vert(1,2)+am2
bari(3,1)=vert(1,1)+am1
bari(3,2)=vert(1,2)+am2
k=0
n=6*m-1
n1=3*m-1
j=2+n
bari(j,1)=vert(1,1)-am2
bari(j,2)=vert(1,2)-am1
do i=2, (3*m-1)*(m-1)
  if ( mod(i-1,n1) .eq. 0 ) then
    k=k+2
  
```

```

endif
j=2*i+k
bari(j,1)=vert(i,1)-am1
bari(j,2)=vert(i,2)+am1
bari(j+1,1)=vert(i,1)+am1
bari(j+1,2)=vert(i,2)+am2
bari(j+2,1)=vert(i,1)+am2
bari(j+2,2)=vert(i,2)+am1
j=j+n
bari(j,1)=vert(i,1)-am2
bari(j,2)=vert(i,2)-am1
bari(j+1,1)=vert(i,1)-am1
bari(j+1,2)=vert(i,2)-am2
bari(j+2,1)=vert(i,1)+am1
bari(j+2,2)=vert(i,2)-am1
enddo
k=-2
n=4*m
k1=1
n1=2*m-1
i=(3*m-1)*(m-1)+1
j=2*i+n+k
j=j+n-1
bari(j,1)=vert(i,1)-am2
bari(j,2)=vert(i,2)-am1
do i=(3*m-1)*(m-1)+2, (3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
    k1=k1+1
    if ( mod(k1-1,n1) .eq. 0 ) then
        k=k+2
    endif
    j=2*i+n+k
    bari(j,1)=vert(i,1)-am1
    bari(j,2)=vert(i,2)+am1
    bari(j+1,1)=vert(i,1)+am1
    bari(j+1,2)=vert(i,2)+am2
    bari(j+2,1)=vert(i,1)+am2

```

```

    bari(j+2,2)=vert(i,2)+am1
    j=j+n-1
    bari(j,1)=vert(i,1)-am2
    bari(j,2)=vert(i,2)-am1
    bari(j+1,1)=vert(i,1)-am1
    bari(j+1,2)=vert(i,2)-am2
    bari(j+2,1)=vert(i,1)+am1
    bari(j+2,2)=vert(i,2)-am1
enddo
i=(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
j=10*m*m
bari(j-1,1)=vert(i,1)+am1
bari(j-1,2)=vert(i,2)-am2
bari(j,1)=vert(i,1)+am2
bari(j,2)=vert(i,2)-am1
RETURN
END

```

C**** PFG.FOR *****

C*** Subrutina para realizar la diferencia de **F** y **G** aplicadas a **alfa**.

```

SUBROUTINE prodGaFa(m,n,xvec,xsal)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common /matrices/A(101,29),B(101,29),C(101,29),D(101,29),f(101)
dimension xvec(451),xsal(451)
do i=1,(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
    xsal(i)=0.d0
enddo
k=-3*m
i=1
if (n .eq. 1) then
    do j=3*m, 6*m-1
        xsal(i)=xsal(i)+A(i,j)*xvec(i+j+k)
    enddo
    do i=2, 3*m-1
        do j=3*m-1, 6*m-1
            xsal(i)=xsal(i)+A(i,j)*xvec(i+j+k)
        enddo
    enddo

```

```

enddo
do i=3*m, (5*m-2)*(m-1)-m
  do j=1, 6*m-1
    xsal(i)=xsal(i)+A(i,j)*xvec(i+j+k)
  enddo
enddo
do i=(5*m-2)*(m-1)-m+1, (5*m-2)*(m-1)
  do j=m+1, 5*m-1
    xsal(i)=xsal(i)+A(i,j)*xvec(i+j+k)
  enddo
enddo
do i=(5*m-2)*(m-1)+1, (3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m-1
  do j=m+1, 3*m+1
    xsal(i)=xsal(i)+A(i,j)*xvec(i+j+k)
  enddo
enddo
i=(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
do j=m+1, 3*m
  xsal(i)=xsal(i)+A(i,j)*xvec(i+j+k)
enddo
else
do j=3*m, 6*m-1
  xsal(i)=xsal(i)+B(i,j)*xvec(i+j+k)
enddo
do i=2, 3*m-1
  do j=3*m-1, 6*m-1
    xsal(i)=xsal(i)+B(i,j)*xvec(i+j+k)
  enddo
enddo
do i=3*m, (5*m-2)*(m-1)-m
  do j=1, 6*m-1
    xsal(i)=xsal(i)+B(i,j)*xvec(i+j+k)
  enddo
enddo
do i=(5*m-2)*(m-1)-m+1, (5*m-2)*(m-1)
  do j=m+1, 5*m-1

```

```

        xsal(i)=xsal(i)+B(i,j)*xvec(i+j+k)
    enddo
enddo
do i=(5*m-2)*(m-1)+1, (3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m-1
    do j=m+1, 3*m+1
        xsal(i)=xsal(i)+B(i,j)*xvec(i+j+k)
    enddo
enddo
i=(3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
do j=m+1, 3*m
    xsal(i)=xsal(i)+B(i,j)*xvec(i+j+k)
enddo
endif
RETURN
END

```

C**** PRE.FOR *****

C*** Subrutina para generar las entradas de la matriz **E** de acoplamiento

C*** aplicada a **xi**.

```

SUBROUTINE prodEx(m,teta,xvec,xsal)
implicit real*8 (a-h,o-z)
dimension xvec(250),xsal(101)
do i=1, (3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
    xsal(i)=0.d0
enddo
E=( (1.d0/dbl(m))**2 )/6.d0
k=0
n=6*m-1
n1=3*m-1
j=2*1+k
xsal(1)= xvec(j)+xvec(j+1)+xvec(j+2)
j=j+n
xsal(1)= xsal(1) + xvec(j)+xvec(j+1)+xvec(j+2)
do i=2, (3*m-1)*(m-1)
    if ( mod(i-1,n1) .eq. 0 ) then
        k=k+2
    endif

```

```

        j=2*i+k
        xsal(i)= xvec(j)+xvec(j+1)+xvec(j+2)
        j=j+n
        xsal(i)= xsal(i) + xvec(j)+xvec(j+1)+xvec(j+2)
    enddo
    k=-2
    n=4*m
    k1=1
    n1=2*m-1
    i=(3*m-1)*(m-1)+1
    j=2*i+n+k
    xsal(i)= xvec(j)+xvec(j+1)+xvec(j+2)
    j=j+n-1
    xsal(i)= xsal(i) + xvec(j)+xvec(j+1)+xvec(j+2)
    do i=(3*m-1)*(m-1)+2, (3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
        k1=k1+1
        if ( mod(k1-1,n1) .eq. 0 ) then
            k=k+2
        endif
        j=2*i+n+k
        xsal(i)= xvec(j)+xvec(j+1)+xvec(j+2)
        j=j+n-1
        xsal(i)= xsal(i) + xvec(j)+xvec(j+1)+xvec(j+2)
    enddo
    do i=1, (3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
        xsal(i)=E*xsal(i)
    enddo
    RETURN
END

```

C*** Subrutina para generar las entradas de la matriz traspuesta de **E**

C*** de acoplamiento aplicada a **alfa**.

```

SUBROUTINE prodETx(m,teta,xvec,xsal)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    dimension xvec(101),xsal(250)
    do i=1, 10*m*m
        xsal(i)=0.d0
    enddo

```

```

enddo
ET=( (1.d0/dbl(m))**2)/6.d0
k=0
n=6*m-1
n1=3*m-1
j=2*1+k
xsal(j-1)= xsal(j-1)
xsal(j)= xsal(j) + xvec(1)
xsal(j+1)= xsal(j+1) + xvec(1)
xsal(j+2)= xsal(j+2) + xvec(1)
j=j+n
xsal(j)= xsal(j) + xvec(1)
xsal(j+1)= xsal(j+1) + xvec(1)
xsal(j+2)= xsal(j+2) + xvec(1)
do i=2, (3*m-1)*(m-1)
  if ( mod(i-1,n1) .eq. 0 ) then
    k=k+2
  endif
  j=2*i+k
  xsal(j)= xsal(j) + xvec(i)
  xsal(j+1)= xsal(j+1) + xvec(i)
  xsal(j+2)= xsal(j+2) + xvec(i)
  j=j+n
  xsal(j)= xsal(j) + xvec(i)
  xsal(j+1)= xsal(j+1) + xvec(i)
  xsal(j+2)= xsal(j+2) + xvec(i)
enddo
k=-2
n=4*m
k1=1
n1=2*m-1
i=(3*m-1)*(m-1)+1
j=2*i+n+k
xsal(j)= xsal(j) + xvec(i)
xsal(j+1)= xsal(j+1) + xvec(i)
xsal(j+2)= xsal(j+2) + xvec(i)

```

```

j=j+n-1
xsal(j)= xsal(j) + xvec(i)
xsal(j+1)= xsal(j+1) + xvec(i)
xsal(j+2)= xsal(j+2) + xvec(i)
do i=(3*m-1)*(m-1)+2, (3*m-1)*(m-1)+(2*m-1)*m
    k1=k1+1
    if ( mod(k1-1,n1) .eq. 0 ) then
        k=k+2
    endif
    j=2*i+n+k
    xsal(j)= xsal(j) + xvec(i)
    xsal(j+1)= xsal(j+1) + xvec(i)
    xsal(j+2)= xsal(j+2) + xvec(i)
    j=j+n-1
    xsal(j)= xsal(j) + xvec(i)
    xsal(j+1)= xsal(j+1) + xvec(i)
    xsal(j+2)= xsal(j+2) + xvec(i)
enddo
j=10*m*m
xsal(j)=xsal(1)
do i=1, 10*m*m
    xsal(i)=ET*xsal(i)
enddo
RETURN
END

```

16.2 Casos analizados y resultados numéricos

Con el problema planteado en (96-97) se analiza el caso advectivo dominante de interés para los fines del trabajo, así como dos más casos posibles de interés, en donde la concentración c del soluto: *a*) no excede; y *b*) cuando rebasa los límites reguladores establecidos por la normatividad. En el *caso a*) no se tiene contaminación y la situación se reduce únicamente a encontrar la solución al problema de transporte advectivo dominante sin restricciones (ADS). En el *caso b*) se tiene un problema típico de contaminación de un acuífero, en donde se exceden los límites permitidos; en este escenario se busca una solución para la concentración que satisfaga tanto la ecuación de transporte, como las restricciones reguladoras dadas por \bar{c} ; es decir se tiene un problema ADC. Los datos específicos para los casos son los siguientes.

Caso a): problema de tipo ADS. Datos iniciales,

$$\left. \begin{aligned}
w &= 1 \text{ m/día}, & k &= 10^{-4} \text{ m}^2/\text{día} \\
d &= 0.1 \text{ 1/día}, & f &= 1 \text{ mg/día} - \text{m}^3 \\
c(x, 0) &= 0 \text{ mg/m}^3, & \gamma c(x, 0) &= 0 \text{ mg/m}^3 \\
\text{con} & & c(\mathbf{x}, t) &\leq 5 \text{ mg/m}^3
\end{aligned} \right\} \quad (112)$$

Caso b): problema de tipo ADC. Datos iniciales,

$$\left. \begin{aligned}
w &= 1 \text{ m/día}, & k &= 10^{-4} \text{ m}^2/\text{día} \\
d &= 0.1 \text{ 1/día}, & f &= 1 \text{ mg/día} - \text{m}^3 \\
c(x, 0) &= 0 \text{ mg/m}^3, & \gamma c(x, 0) &= 0 \text{ mg/m}^3 \\
\text{con} & & c(\mathbf{x}, t) &\leq 2 \text{ mg/m}^3
\end{aligned} \right\} \quad (113)$$

En ambas situaciones se maneja el mismo problema formal, lo único que varía es el valor de la restricción \bar{c} ; la elección apropiada de los valores para w y k determina situaciones advectivo dominantes. Con respecto al algoritmo primal en la Figura 1 se muestra el resultado obtenido con los datos indicados en (112). En la Figura 2, se presenta la solución para los datos (113). Por otra parte, en la Figura 3 se presentan los resultados para el campo dual determinados con el algoritmo mixto de control interno dualizado para el caso (113); debe notarse que la magnitud de la solución dual del caso (112) es siempre cero. En las tres figuras el tiempo transcurrido de la simulación numérica es de 12.5 días.

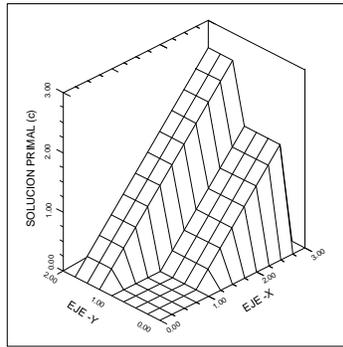


Figura 1. Solución del algoritmo primal sin especificación de control a 12.5 días.

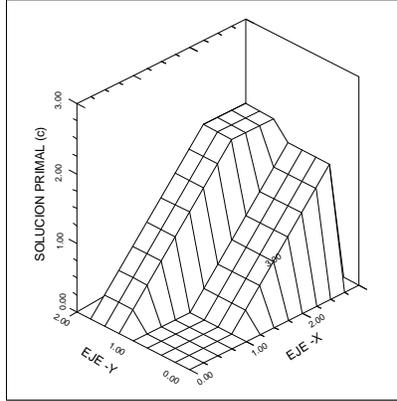


Figura 2. Solución del algoritmo primal con control a 12.5 días.

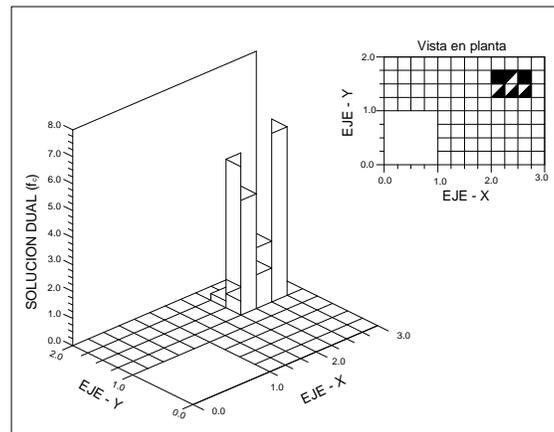


Figura 3. Solución del algoritmo mixto para el campo dual a 12.5 días.

16.3 Significado de los resultados

La solución analítica (111) es discontinua sobre la línea interior $(1, 3) \times \{1\}$, con frentes abruptos sobre los lados de la frontera $(1, 3) \times \{0\}$, $\{3\} \times (0, 2)$ y $(0, 3) \times \{2\}$. El número de Péclet del problema establecido en los casos *a*) y *b*) es de 3535; el rango de números de Péclet analizado en el trabajo está entre 10 y 10000, obteniéndose buenos resultados. Estas características permiten probar los algoritmos ante situaciones críticas advectivo dominantes y de avance de frentes discontinuos.

En Ikeda (1983) se establece que los procedimientos de diferencias finitas centrales y de elemento finito de tipo Ritz-Galerkin, que no manejan adecuadamente al término advectivo, determinan soluciones físicamente inadmisibles, oscilaciones sin significado físico, para números de Péclet superiores a 10. En Alduncin y Carrera (1991) se prueba numéricamente la eficacia de la técnica upwind de Tabata (Ikeda, 1983) para números de Péclet de hasta 166,666. En Ikeda (1983) se analizan diferentes esquemas, de diferencias y elemento finito, de upwind que satisfacen el principio de máximo y/o de conservación de masa discretos;

establece que el upwind parcial es la técnica más adecuada para resolver la ecuación de transporte 3(60), para cuando se tienen altas velocidades de Darcy.

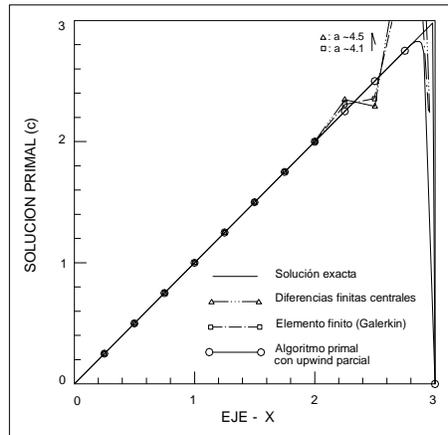


Figura 4. Comparación de diferencias y elemento finito, sin tratamiento para el término advectivo, con el algoritmo primal (upwind parcial).

En la Figura 4 se comparan las soluciones del problema ADS, *caso a*), dadas por los procedimientos de: diferencias finitas centrales, elemento finito de tipo Galerkin con el algoritmo primal que se propone; al tiempo de simulación numérica de 12.5 días, y sobre la línea $Y=1.5$. El algoritmo primal determina la mejor aproximación debido a que está equipado con el tratamiento de upwind parcial de Ikeda para el término advectivo; lo que permite calcular con mayor precisión la solución de problemas advectivo dominantes.

Con relación al esquema de manejo, la restricción de 5 mg/m^3 en (112) no impone control a la concentración y el problema resulta ser del tipo ADS. Por el contrario, los datos en (113) presentan un problema de tipo ADC no lineal ya que, simultáneamente se busca que la solución para c sea menor o igual que 2 mg/m^3 ; en este caso se tiene que la concentración rebasa el límite regulatorio de 2 mg/m^3 (de acuerdo con (111) la concentración presenta un máximo de 3 mg/m^3), y existe un problema de contaminación por sustancias disueltas, debido que en algunas regiones del acuífero podrían encontrarse concentraciones superiores a los 2 mg/m^3 .

En el *caso a*) debido a que la restricción (112) es siempre superior al máximo de (111), la solución numérica primal mostrada en la Figura 1 especifica una rampa completa; por su parte el algoritmo mixto determina como solución a la función cero, ya que el mecanismo de control no efectúa ninguna acción sobre el campo solución c (porque de hecho, siempre se satisface que $\max \{c(\mathbf{x}, t)\} = 3 \text{ mg/m}^3 \leq \bar{c}(\mathbf{x}, t) = 5 \text{ mg/m}^3$). En el *caso b*) la restricción (113) es más pequeña que el máximo de (111), por tal motivo el procedimiento calcula una rampa truncada en la Figura 2; y el algoritmo mixto establece valores no cero para el campo dual en la Figura 3, en las regiones donde la concentración c tiende a ser mayor que la cota regulatoria (en esta situación si se ejercen acciones sobre el sistema). En ambos casos los algoritmos determinan las soluciones para la concentración y campo dual que satisfacen: el balance de masa, condiciones iniciales y de frontera, así

como la restricción \bar{c} para c en cada posición del acuífero en estudio $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T)$; el método propuesto demuestra eficiencia en problemas advectivo dominantes y determina las soluciones numéricas apropiadas de cada tipo de problema.

17 Conclusión

Se propone una forma de analizar el flujo en dos fases en medios porosos y/o fracturados, mediante los problemas correspondientes de flujo y transporte monifásico. Desde la perspectiva del flujo fraccional se establece una descomposición de modelos de flujo bifásico, mediante problemas correspondientes en velocidad y presión y de transporte de solutos advectivo dominantes. El planteamiento de la solución numérica de los problemas resultantes se fundamenta en el análisis convexo, subdiferenciales, formulaciones variacionales y algoritmos iterativos de punto próximo de tipo Uzawa de penalidad dualización.

La implementación numérica del problema en velocidad y presión se realiza mediante elemento finito mixto macrohíbrido, que habilita la posibilidad de resolver con precisión los campos de velocidad y presión de manera simultánea (Alduncin y Vera, 2003). La aproximación se efectúa empleando descomposición de dominios, mediante subdominios que no se traslapan dos a dos; así como condiciones de continuidad de transmisión dualizadas. Las igualdades variacionales discretas se resuelven mediante caracterizaciones de operadores de proximidad y proyección. El procedimiento que se propone se compone de tres variantes denominadas $(\widetilde{\text{ALG}}_1)$ - $(\widetilde{\text{ALG}}_3)$ que dan solución a los campos de velocidad y presión de manera simultánea. La teoría se basa en argumentos físicos con un marco matemático de subdiferenciales; la ecuación de balance de masa toma en cuenta las componentes de velocidad \mathbf{u} y presión p de manera explícita, así como los de fuente/sumidero para la fase agua; el balance de momentum es considerado explícitamente mediante la relación de Darcy. Los procedimientos se prueban mediante dos ejemplos sintéticos. Con los ejemplos numéricos también se demuestran las propiedades de convergencia de los diferentes algoritmos, así como la existencia de parámetros de penalización exacta r , como función del tamaño de malla h . En las situaciones analizadas por Alduncin y Vera, 2003, los algoritmos determinan las soluciones numéricas apropiadas.

Con respecto al modelo de solución propuesto para el problema de transporte advectivo dominante, se establecen los aspectos heurísticos y constructivos para el diseño de un tipo de algoritmos para abordar este tipo de problemas, así como de manejo para la rehabilitación de acuíferos contaminados por solutos; al igual que para el caso anterior se emplea la teoría de análisis convexo, subdiferenciales, formulaciones variacionales y algoritmos de punto próximo de tipo Uzawa de penalidad dualización. El procedimiento conforma un modelo de control o de manejo, ya que aparte de la solución numérica predictiva de la ecuación de transporte, simultáneamente se busca que la solución satisfaga límites establecidos por las normas de calidad del agua; el esquema completo se compone por el algoritmo primal $(\widetilde{\text{MTP}}_h)$ que determina la solución para la concentración, y el mixto de control interno dualizado $(\widetilde{\text{MTM}}_h)$, que estima las magnitudes del campo dual o mecanismo de control. La teoría se basa en argumentos físicos con un marco matemático de

subdiferenciales; los algoritmos derivados se implementan numéricamente mediante aproximaciones internas de elemento finito de tipo semidiscreto y un esquema θ en el tiempo, con tratamiento upwind parcial para el término advectivo. Las aproximaciones totalmente discretas garantizan la satisfacción del principio de máximo y de conservación de masa discretos, así como la convergencia uniforme en L^∞ . Las desigualdades variacionales discretas resultantes se resuelven mediante técnicas iterativas de Uzawa. La ecuación de balance de masa toma en cuenta las componentes de advección y difusión, así como los términos de: absorción cinética de primer orden y de fuente/sumidero para la concentración. Se especifica la aplicación de la teoría mediante un ejemplo hipotético, con el que se analizan los dos casos posibles para la concentración de un soluto en un campo de flujo: cuando rebasa y cuando no excede los límites de calidad del agua. Se demuestra numéricamente que los algoritmos primal y mixto son robustos ante situaciones advectivo dominantes. En la situaciones analizadas los algoritmos determinan las soluciones numéricas apropiadas.

La principal ventaja del contexto matemático empleado (de análisis convexo y subdiferenciales) lo conforma la simpleza y la unidad teórica necesaria para abordar, bajo un mismo marco de trabajo, los problemas en velocidad y presión y de transporte de solutos advectivo dominantes; lo cual se debe a que el concepto de subdiferenciales proporciona un ambiente natural necesario para establecer la formulación variacional de problemas de valores inicial y a la frontera, que luego pueden ser implementados en computadora.

Los procedimientos propuestos para el tratamiento de los problemas en velocidad y presión, así como de transporte monofásico dan una solución, desde la perspectiva de flujo fraccional, al problema del flujo en dos fases en sistemas acuíferos.

18 Limitantes

La formulación de flujo fraccional presenta ventajas y sencillez de enfoque, pero también presenta desventajas, entre las que se pueden citar: la falta del significado físico de la relación para la presión total, la complicación asociada a la implementación de condiciones de frontera en fases individuales en vez de combinaciones de ellas; así como las complicaciones inducidas por los términos de gravedad. Los procedimientos numéricos basados en el concepto de flujo fraccional son eficaces en problemas simples, pero su extensión a problemas prácticos y/o reales aún está por demostrarse. Además de la perspectiva del flujo fraccional, existen enfoques alternativos, sin que por esto sean contradictorios, entre los que destacan formulaciones presión-presión, presión-saturación, modelos de petróleo-negro, modelos basados en las relaciones de colisión de Boltzmann, etc.

Ademas del contexto matemático empleado (de análisis convexo, subdiferenciales, formulaciones variacionales y algoritmos iterativos de Uzawa), también existen enfoques alternativos como los de volumen finito, diferencias finitas, métodos Eulerianos-Lagrangianos y de adjunto localizados, de direcciones características, soluciones integrales, soluciones de frontera, etc.

El enfoque empleado para el análisis de los problemas correspondientes en velocidad y presión y de

transporte es completamente general y puede aplicarse a cualquier sistema acuífero real. Debido al carácter metodológico del proyecto de trabajo, el alcance solamente consiste en el plantemamiento y prueba de la teoría mediante ejemplos sintéticos. Los ejemplos sintéticos prueban los aspectos fundamentales de la eficacia de los procedimientos numéricos de solución propuestos; sin embargo los códigos computacionales, desarrollados para probar la bondad de los algoritmos, no son lo suficientemente generales como para ser empleados en sistemas reales.

19 Dirección de trabajos futuros

Un sistema acuífero real mantiene rasgos particulares diferenciadores complejos definidos por sus propias unidades geológicas y aspectos hidráulicos e hidrogeológicos, los cuales determinan los parámetros de superficie, así como los subterráneos. Los códigos en computadora desarrollados para realizar las pruebas de los algoritmos (de velocidad-presión y de transporte) pueden ampliarse para que tomen en cuenta: zonificación de parámetros de flujo y transporte, geometrías de acuíferos, condiciones iniciales y a la frontera, restricciones, cadenas de reacción y esfuerzos hidrogeológicos arbitrarios, dependientes de cada sitio.

Los códigos en el problema de velocidad y presión pueden extenderse para que incluyan efectos de compresibilidad; más aún, es posible extender los algoritmos para que consideren situaciones no estacionarias del modelo; bajo condiciones generales iniciales y de frontera (Dirichlet, Neumann y Mixtas). Una extensión de mayor alcance consiste en desarrollar, desde la perspectiva de análisis convexo y subdiferenciales, los aspectos teóricos y metodológicos para la construcción de algoritmos numéricos que resuelvan los problemas de tres fases y composicional con intercambio de masa entre las fases.

Por su parte, los códigos en el problema de transporte pueden extenderse para incluir los casos en los que los parámetros \mathbf{D} , \mathbf{u} , f y d sean espacial y posiblemente temporalmente dependientes, incluyendo condiciones iniciales y de frontera Dirichlet, Neumann y Mixtas generales; también es posible extender el problema de control al de control óptimo.

Aunque en el Capítulo III, secciones 9-12, se tocaron algunos aspectos relacionados con la existencia, unicidad, estabilidad, convergencia, principios de conservación y de máximo de problemas elípticos, en velocidad-presión y de transporte; el trabajo de análisis matemático, que aún resta por realizar es formidable, en lo relacionado con las formulaciones fuertes de los problemas de valores inicial y a la frontera y formulaciones variacionales fuertes asociadas; más aún, es necesario mucho trabajo de análisis en las formulaciones variacionales débiles generales y particulares; y no solamente lo anterior, también es necesario el análisis funcional de los diferentes procedimientos específicos de discretización naturales de cada problema, es necesario explicitar la manera en que las formas discretas heredan las propiedades de las formulaciones fuertes y débiles. No parece suficiente el análisis numérico desarrollado hasta la fecha; también son necesarias formulaciones alternas a la tratada en este proyecto, y en última instancia constatar o desechar sus resultados desde la perspectiva del trabajo experimental.

Desde el contexto de análisis variacional, aún falta por explorar formulaciones alternas de los problemas en velocidad-presión y de transporte, tales como las: primales, mixtas-primales, duales-primales, mixto-duales, duales-duales, etc.; así como también estudiar los aspectos relacionados con la existencia, unicidad, estabilidad, convergencia, principios de conservación y de máximo de dichas formulaciones.

A juzgar por los trabajos realizados sobre el concepto de flujo fraccional, aún hacen falta análisis de los aspectos matemáticos de las formulaciones físicas, de los sistemas de ecuaciones de conservación que rigen el comportamiento del flujo y transporte multifásico y composicional; también parece que aún no está claro el significado físico de las variables y relaciones introducidas en la teoría, tampoco se conocen los rangos aplicabilidad de las diferentes formulaciones físicas, ni están suficientemente exploradas las posibles condiciones de frontera naturales de dichos sistemas; a lo anterior debe también añadirse que, aún faltan por desarrollarse más los análisis de existencia, unicidad, estabilidad, convergencia, principios de conservación y de máximo de las ecuaciones generales y particulares de flujo multifásico y composicional. Finalmente, parece que últimamente casi nada se ha hecho de trabajos experimentales de laboratorio y campo relacionados con el flujo y transporte multifásico y composicional; lo anterior quizás se debe a la enorme complejidad del problema, los pocos incentivos para desarrollar investigaciones relacionadas y la recalcitrante moda de solamente hacer trabajos en computadora. Como siempre ha ocurrido en física, los trabajos experimentales (del flujo y transporte multifásico y composicional) conforman el núcleo desde el cual se confirmará o desechará cualquier estructura formal que pretenda describirlos; sin embargo, es virtualmente imposible encontrar un trabajo que mantenga el sutil equilibrio entre el desarrollo formal y los resultados de laboratorio en el área, los trabajos encontrados pertenecen a una u otra categoría, lo que probablemente delata el poco avance que se ha tenido en la disciplina.

20 Apéndices

20.1 Del Capítulo II

Deducción de la ecuaciones (9)_{1,2}. Desarrollando el término $div(\rho\mathbf{u})$ de la ecuación (7)₁, donde ρ y \mathbf{u} son campos escalar y vectorial respectivamente, de acuerdo con Gurtin (1981) se tiene que,

$$div(\rho\mathbf{u}) = \rho div(\mathbf{u}) + \nabla\rho \cdot \mathbf{u}.$$

Por lo que la Ley de Darcy establecida en la ecuación (7)₂ y la relación de estado (8), dan como resultado,

$$\begin{aligned} \rho div(\mathbf{u}) &= \rho div \left\{ -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho\mathbf{g}) \right\} = \rho div \left\{ -\frac{k}{\mu} \left(\frac{1}{z\rho} \nabla\rho - \rho\mathbf{g} \right) \right\} \\ &= \rho div \left\{ -\frac{k}{\mu z\rho} (\nabla\rho - z\rho^2\mathbf{g}) \right\} = \rho div \left\{ \frac{1}{\rho} \mathbf{u}' \right\}, \quad y \\ \nabla\rho \cdot \mathbf{u} &= \nabla\rho \cdot \left\{ -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho\mathbf{g}) \right\} = \nabla\rho \cdot \left\{ -\frac{k}{\mu z\rho} (\nabla\rho - z\rho^2\mathbf{g}) \right\} = \nabla\rho \cdot \left\{ \frac{1}{\rho} \mathbf{u}' \right\}. \end{aligned}$$

Donde:

$$\mathbf{u}' = -\frac{k}{\mu z} (\nabla\rho - z\rho^2\mathbf{g}).$$

Lo que demuestra (9)₂. Usando la relación anterior se tiene que,

$$div(\rho\mathbf{u}) = \rho div \left\{ \frac{1}{\rho} \mathbf{u}' \right\} + \nabla\rho \cdot \left\{ \frac{1}{\rho} \mathbf{u}' \right\} = div \left\{ \rho \left(\frac{1}{\rho} \mathbf{u}' \right) \right\} = div(\mathbf{u}').$$

Con lo que se demuestra (9)₁.

Deducción de la ecuación (13). Efectuando las diferenciaciones indicadas en la ecuación (10) y dividiendo el resultado por ρ_i se obtiene que,

$$\begin{aligned} \phi c_i \frac{1}{\rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \phi \frac{\partial c_i}{\partial t} + c_i div \mathbf{u} + \frac{c_i}{\rho_i} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho_i \\ + \mathbf{u} \cdot \nabla c_i - \frac{1}{\rho_i} (\mathbf{D} \nabla c_i) \cdot \nabla \rho_i - div(\mathbf{D} \nabla c_i) = c_i q. \end{aligned}$$

Por lo que de (11) y (12), se obtiene que,

$$\sum_{i=1}^N \phi z_i c_i \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} + \sum_{i=1}^N z_i (c_i \mathbf{u} - \mathbf{D} \nabla c_i) \cdot \nabla p = q,$$

ya que,

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial c_i}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \nabla c_i = \sum_{i=1}^N \operatorname{div} (\mathbf{D} \nabla c_i) = 0.$$

De (12) y por la derivada de una constante. Con lo que se demuestra (13).

Deducción de la ecuación (21). Tomando en cuenta las igualdades de la definición del flujo fraccional (17)-(19),

$$f_w + f_a = \frac{\lambda_w}{\lambda} + \frac{\lambda_a}{\lambda} = \frac{\lambda_w + \lambda_a}{\lambda} = \frac{\lambda_w + \lambda_a}{\lambda_w + \lambda_a} = 1.$$

Por lo que la integral de (21), sabiendo que $p_c(S_c) = 0$ y usando (16), queda como:

$$\frac{1}{2} \int_{S_c}^S (f_a - f_w) \frac{dp_c}{d\xi} d\xi = \frac{1}{2} \int_{S_c}^S (1 - 2f_w) \frac{dp_c}{d\xi} d\xi = \frac{1}{2} (p_a - p_w) - \int_{S_c}^S f_w(\mathbf{x}, S) \frac{dp_c}{d\xi} d\xi.$$

Aplicando cambio de variable a esta última integral, Apostol (1965),

$$\int_a^b f(x) dx = \int_c^d f[g(t)] g'(t) dt,$$

donde $a = g(c)$ y $b = g(d)$; suponiendo, como es el caso, que g tiene derivadas continuas en $[c, d]$ y que f es continua en el conjunto de valores que toma $g(t)$ al variar t en el intervalo $[c, d]$. Finalmente obtenemos lo siguiente,

$$\frac{1}{2} \int_{S_c}^S (f_a - f_w) \frac{dp_c}{d\xi} d\xi = \frac{1}{2} (p_a - p_w) - \int_0^{p_c(S)} f_w(\mathbf{x}, p_c^{-1}(\xi)) d\xi.$$

Substituyendo esta igualdad en (21), se obtiene el resultado buscado.

Deducción de las ecuaciones (23)₁-(26)₂. Primeramente observamos que (23)₁ se obtiene directamente sumando (14)₁ sobre α . De (21) se obtiene que,

$$\nabla p = \nabla p_a - f_w(\mathbf{x}, S) \nabla p_c - \int_0^{p_c(S)} \nabla_x f_w(\mathbf{x}, p_c^{-1}(\xi)) d\xi,$$

de modo que,

$$\nabla p_a = \nabla p + f_w \nabla p_c + \int_0^{p_c(S)} \nabla_x f_w(\mathbf{x}, p_c^{-1}(\xi)) d\xi.$$

Lo anterior, juntamente con (16) deriva en,

$$\nabla p_w = \nabla p - f_a \nabla p_c + \int_0^{p_c(S)} \nabla_x f_w(\mathbf{x}, p_c^{-1}(\xi)) d\xi.$$

De este modo, por (14)₂ se tiene que,

$$\rho_w \mathbf{u}_w = -k\lambda_w \left(\nabla p - f_a \nabla p_c + \int_0^{p_c(S)} \nabla_x f_w(\mathbf{x}, p_c^{-1}(\xi)) d\xi - \rho_w \mathbf{g} \right), \quad (\text{A1})$$

y,

$$\rho_a \mathbf{u}_a = -k\lambda_a \left(\nabla p + f_w \nabla p_c + \int_0^{p_c(S)} \nabla_x f_w(\mathbf{x}, p_c^{-1}(\xi)) d\xi - \rho_a \mathbf{g} \right). \quad (\text{A2})$$

Finalmente, aplicando (22) se obtiene,

$$\mathbf{u} = -k\lambda \left(\nabla p + \int_0^{p_c(S)} \nabla_x f_w(\mathbf{x}, p_c^{-1}(\xi)) d\xi - (f_w \rho_w + f_a \rho_a) \mathbf{g} \right), \quad (\text{A3})$$

por lo que necesariamente se satisface (23)₂ por la definición de $\omega(p, S)$. Si se substituye la expresión para \mathbf{u} en (A3) en (A1) se deduce que,

$$\rho_w \mathbf{u}_w = f_w \mathbf{u} + k\lambda f_w f_a (\nabla p_c + (\rho_w - \rho_a) \mathbf{g}),$$

lo que implica (26)₁, y junto con (14)₁ con $\alpha = w$, se deduce la relación (24). Finalmente, substituyendo \mathbf{u} en (A3) en (A2) se obtiene (26)₂.

20.2 Del Capítulo III

Deducción de la formulación (MHM). Primeramente multiplicamos a $(P_e)_1$ por \mathbf{v} , luego efectuamos la integración en la región de estudio Ω , usando la relación $\text{div}[p_e \mathbf{v}] = p_e \text{div} \mathbf{v} + \mathbf{grad} p_e \cdot \mathbf{v}$, y el teorema de la divergencia, se obtiene lo siguiente,

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e^{-1} \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{v} &= - \int_{\Omega_e} \mathbf{grad} p_e \cdot \mathbf{v} + \int_{\Omega_e} \rho_e \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \\
 &= - \int_{\Omega_e} \text{div}[p_e \mathbf{v}] + \int_{\Omega_e} p_e \text{div} \mathbf{v} + \int_{\Omega_e} \rho_e \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \\
 &= - \int_{\partial\Omega_e} [p_e \mathbf{v}] \cdot \mathbf{n}_e + \int_{\Omega_e} p_e \text{div} \mathbf{v} + \int_{\Omega_e} \rho_e \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}
 \end{aligned}$$

Ahora bien, la integral sobre la frontera $\partial\Omega_e$ se puede expresar de la siguiente forma,

$$\begin{aligned}
 \int_{\partial\Omega_e} p_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e &= \int_{\partial\Omega_{De} \cup \partial\Omega_{Ne} \cup \Gamma_e} p_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e \\
 &= \int_{\partial\Omega_{De}} p_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e + \int_{\partial\Omega_{Ne}} p_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e + \int_{\Gamma_e} r_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e \\
 &= \int_{\partial\Omega_{De}} p_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e + \int_{\Gamma_e} r_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}_{0ne}
 \end{aligned}$$

donde \mathbf{K}_{0ne} es el campo de condiciones Neumann homogéneas, $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e = 0$ en $\partial\Omega_{Ne}$, ecuación (52). Combinando las dos últimas relaciones se obtiene $(\mathbf{MHM})_1$. Para deducir $(\mathbf{MHM})_2$ se multiplica a $(P_e)_2$ por $q \in Y(\Omega_e)$ y se integra sobre Ω_e . Ahora se tiene que las condiciones de transmisión satisfacen $\{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\} \in \partial I_{\mathbf{Q}_D}(\{r_e\})$, por lo que de la definición de subdiferencial, ecuación (36), se tiene que,

$$\begin{aligned}
 \{r_e\} &\in \mathcal{D}(I_{\mathbf{Q}_D}) \equiv \mathbf{Q}_D : \{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\} \in \partial I_{\mathbf{Q}_D}(\{r_e\}) \\
 I_{\mathbf{Q}_D}(\{s_e\}) &\geq I_{\mathbf{Q}_D}(\{r_e\}) + \{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\} \{s_e - r_e\}, \quad \forall \{s_e\} \in \mathbf{Q}_D \\
 0 &\geq 0 + \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e \{s_e - r_e\}, \quad \forall \{s_e\} \in \mathbf{Q}_D
 \end{aligned}$$

por lo que sumando e integrando sobre los E subdominios, finalmente se obtiene $(\mathbf{MHM})_3$. \square

Deducción de las relaciones (\mathbf{MHM}_h) y (57). Para deducir la formulación (\mathbf{MHM}_h) se integra término a término las entradas especificadas en la formulación (\mathbf{MHM}) , para lo cual primeramente se definen a: \mathbf{u}_{he} , \mathbf{v} , p_{he} , q_{he} , r_{he} y s_{he} de la siguiente manera,

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_{he}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_{he}} \alpha_{e,j} \phi_{e,j}(\mathbf{x}) ; \quad \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{n_{he}} \beta_{e,i} \phi_{e,i}(\mathbf{x}) \in \mathbf{V}_{he} \\ p_{he}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{m_{he}} \lambda_{e,m} \zeta_{e,m}(\mathbf{x}) ; \quad q_{he} = \sum_{m=1}^{m_{he}} \mu_{e,m} \zeta_{e,m}(\mathbf{x}) \in Y_{he} \\ r_{he}(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{k_{he}} \pi_{e,k} \xi_{e,k}(\mathbf{x}) ; \quad s_{he} = \sum_{k=1}^{k_{he}} \nu_{e,k} \xi_{e,k}(\mathbf{x}) \in L^2(\Gamma_e) \end{array} \right. \quad (\text{A4})$$

Por lo que, para el primer término $\mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e \cdot \boldsymbol{\beta}$ del problema (\mathbf{MHM}_h) , primeramente se define a \mathbf{u}_{he} y a \mathbf{v} como en $(\text{A4})_1$, entonces el miembro izquierdo de $(\mathbf{MHM})_1$ se puede expresar como,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e^{-1} \mathbf{u}_{he} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega_e &= \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e^{-1} \left(\sum_{j=1}^{n_{he}} \alpha_{e,j} \phi_{e,j} \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n_{he}} \beta_{e,i} \phi_{e,i} \right) \, d\Omega_e \\ &= \sum_{j=1}^{n_{he}} \alpha_{e,j} \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e^{-1} \phi_{e,j} \cdot \left(\sum_{i=1}^{n_{he}} \beta_{e,i} \phi_{e,i} \right) \, d\Omega_e \\ &= \sum_{j=1}^{n_{he}} \alpha_{e,j} \left(\sum_{i=1}^{n_{he}} \beta_{e,i} \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e^{-1} \phi_{e,j} \cdot \phi_{e,i} \, d\Omega_e \right) \\ &= \sum_{j=1}^{n_{he}} \alpha_{e,j} \left(\sum_{i=1}^{n_{he}} \beta_{e,i} A_{i,j}^e \right) = \mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e \cdot \boldsymbol{\beta} \end{aligned}$$

$$\text{donde } A_{i,j}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e^{-1} \phi_{e,j} \cdot \phi_{e,i} \, d\Omega_e, \quad \text{con } i, j = 1, \dots, n_{he}.$$

Obsérvese que en este caso se tiene los siguiente,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e \cdot \boldsymbol{\beta} &= \begin{pmatrix} A_{1,1}^e & A_{1,2}^e & A_{1,3}^e & \dots & A_{1,n_{he}}^e \\ A_{2,1}^e & A_{2,2}^e & A_{2,3}^e & \dots & A_{2,n_{he}}^e \\ A_{3,1}^e & A_{3,2}^e & A_{3,3}^e & \dots & A_{3,n_{he}}^e \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n_{he},1}^e & A_{n_{he},2}^e & A_{n_{he},3}^e & \dots & A_{n_{he},n_{he}}^e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{e,1} \\ \alpha_{e,2} \\ \alpha_{e,3} \\ \dots \\ \alpha_{e,n_{he}} \end{pmatrix} \cdot \left(\beta_{e,1} \quad \beta_{e,2} \quad \beta_{e,3} \quad \dots \quad \beta_{e,n_{he}} \right) \\ &= \begin{pmatrix} A_{1,j}^e \alpha_{e,j} \\ A_{2,j}^e \alpha_{e,j} \\ A_{3,j}^e \alpha_{e,j} \\ \dots \\ A_{n_{he},j}^e \alpha_{e,j} \end{pmatrix} \cdot \left(\beta_{e,1} \quad \beta_{e,2} \quad \beta_{e,3} \quad \dots \quad \beta_{e,n_{he}} \right) = A_{i,j}^e \alpha_{e,j} \beta_{e,i}, \quad \text{para } i, j = 1, \dots, n_{he} \end{aligned}$$

Los restantes términos $\mathbf{f}^e \cdot \boldsymbol{\beta}$, $\mathbf{L}^{eT} \boldsymbol{\lambda}_e \cdot \boldsymbol{\beta}$, $\mathbf{T}^{eT} \boldsymbol{\pi}_e \cdot \boldsymbol{\beta}$, $\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e \cdot \boldsymbol{\mu}$, $\mathbf{q}^e \cdot \boldsymbol{\mu}$ y la condición de sincronización $\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e \cdot (\boldsymbol{\nu}_e - \boldsymbol{\pi}_e)$ del problema (\mathbf{MHM}_h) se deducen de manera similar, con lo que se completa la deducción. \square

Deducción del algoritmo $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_1)$. De la ecuación $(\mathbf{MHM}_h)_1$ y de la definición del subdiferencial (36), se tiene lo siguiente,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}_e \in \mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}} : I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}(\boldsymbol{\beta}) + \mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}_e\} \geq \\ I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}(\boldsymbol{\alpha}_e) + \mathbf{f}^e \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}_e\} - \{\mathbf{L}^{eT} \boldsymbol{\lambda}_e + \mathbf{T}^{eT} \boldsymbol{\pi}_e\} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}_e\}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}. \end{aligned}$$

Por lo que $(\mathbf{MHM}_h)_1$ está en el subdiferencial de $I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}$ en $\boldsymbol{\alpha}_e$; es decir,

$$\begin{aligned} -\mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e + \mathbf{f}^e - \{\mathbf{L}^{eT} \boldsymbol{\lambda}_e + \mathbf{T}^{eT} \boldsymbol{\pi}_e\} \in \partial I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}(\boldsymbol{\alpha}_e) \Leftrightarrow \\ -\{\mathbf{L}^{eT} \boldsymbol{\lambda}_e + \mathbf{T}^{eT} \boldsymbol{\pi}_e\} \in \mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e + \partial I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}(\boldsymbol{\alpha}_e) - \mathbf{f}^e \equiv \mathcal{A}^e(\boldsymbol{\alpha}_e) \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

De manera similar, tomando $(\mathbf{MHM}_h)_2$ se tiene que,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\lambda}_e \in \mathfrak{R}^{m_{he}} : (I_{\{0\}})^*(\boldsymbol{\mu}) + \mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e \cdot \{\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\lambda}_e\} \geq \\ (I_{\{0\}})^*(\boldsymbol{\lambda}_e) - \mathbf{q}^e \cdot \{\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\lambda}_e\}, \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathfrak{R}^{m_{he}}, \end{aligned}$$

es decir,

$$\begin{aligned} -\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e - \mathbf{q}^e \in \partial (I_{\{0\}})^*(\boldsymbol{\lambda}_e) \equiv \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e + \mathbf{q}^e \in \partial (I_{\{0\}})^*(\boldsymbol{\lambda}_e) \Leftrightarrow \\ \mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e \in \partial (I_{\{0\}})^*(\boldsymbol{\lambda}_e) - \mathbf{q}^e \equiv \partial \mathbf{G}^{e*}(\boldsymbol{\lambda}_e) \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

Finalmente, usando $(\mathbf{MHM}_h)_3$ se obtiene lo siguiente,

$$\begin{aligned} \{\boldsymbol{\pi}_e\} \in \mathbf{Q}_{Dh} : I_{\mathbf{Q}_{Dh}}(\{\boldsymbol{\nu}_e\}) \geq I_{\mathbf{Q}_{Dh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e\}) + \sum_{e=1}^E \mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e \cdot \{\boldsymbol{\nu}_e - \boldsymbol{\pi}_e\}, \quad \forall \{\boldsymbol{\nu}_e\} \in \mathbf{Q}_{Dh} \\ \Leftrightarrow \{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e\} \in \partial I_{\mathbf{Q}_{Dh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e\}). \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

Por lo que usando las tres últimas relaciones (A5-A7) el problema (\mathbf{MHM}_h) se transforma en,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\boldsymbol{\alpha}_e, \boldsymbol{\lambda}_e) \in \mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}} \times \mathfrak{R}^{m_{he}}, \text{ para } e = 1, \dots, E : \\ -\mathbf{L}^{eT} \boldsymbol{\lambda}_e - \mathbf{T}^{eT} \boldsymbol{\pi}_e \in \mathcal{A}^e(\boldsymbol{\alpha}_e) \\ \mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e \in \partial \mathbf{G}^{e*}(\boldsymbol{\lambda}_e) \\ \text{y } \{\boldsymbol{\pi}_e\} \in \mathbf{Q}_{Dh} \text{ satisface la condición de sincronización} \\ \{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e\} \in \partial I_{\mathbf{Q}_{Dh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e\}) \end{array} \right. \quad (\mathbf{MHM}'_h)$$

El cual se simplifica al siguiente problema abstracto,

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

El cual puede ser transformado al siguiente problema,

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

Por lo que el algoritmo equivalente de punto próximo esta dado de la siguiente forma,

$$\begin{cases} \text{Dado } \boldsymbol{\alpha}^0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A}), \boldsymbol{\lambda}_0^* \in \mathcal{D}(\partial\mathbf{G}^*), \text{ conocido } \boldsymbol{\alpha}^m, \boldsymbol{\lambda}_m^*, m \geq 0, \text{ calcule } \boldsymbol{\alpha}^{m+1} \text{ y } \boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* : \\ -\boldsymbol{\Lambda}^T (\boldsymbol{\lambda}_m^* - \text{Prox}_{r\mathbf{G}^{\circ}(1/r)\mathbf{I}}(\boldsymbol{\lambda}_m^* + r\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}^m)) \in (\mathcal{A} + r\boldsymbol{\Lambda}^T\boldsymbol{\Lambda})(\boldsymbol{\alpha}^{m+1}) \\ \boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* = (\mathbf{I} - \text{Prox}_{r\mathbf{G}^{\circ}(1/r)\mathbf{I}})(\boldsymbol{\lambda}_m^* + r\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}^{m+1}) \end{cases} \quad (\mathbf{ALG}_1)$$

Ahora, para la deducción del $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_1)$, se tiene de $(\mathbf{ALG}_1)_2$ que $\boldsymbol{\lambda}_{m+1}^* = (\mathbf{I} - \text{Prox}_{r\mathbf{G}^{\circ}(1/r)\mathbf{I}})(\boldsymbol{\lambda}_m^* + r\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}^{m+1})$ por lo que substituyendo se obtiene lo siguiente,

$$\begin{aligned} (\{\boldsymbol{\lambda}_e^{m+1}\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^{m+1}\}) &= (\mathbf{I} - \text{Prox}_{r\mathbf{G}^{\circ}(1/r)\mathbf{I}}) (\{(\boldsymbol{\lambda}_e^m), \{\boldsymbol{\pi}_e^m\}\} + r(\{\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}, \{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\})) \\ &= (\mathbf{I} - \text{Prox}_{r\mathbf{G}^{\circ}(1/r)\mathbf{I}}) (\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\} + r\{\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}), \\ &= (\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\} + r\{\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}) \\ &\quad - \text{Prox}_{r\mathbf{G}^{\circ}(1/r)\mathbf{I}} (\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\} + r\{\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}) \\ &= (\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\} + r\{\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}) - (-r\{\mathbf{q}^e\}, \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\})) \\ &= (\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\} + r\{\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\} + r\{\mathbf{q}^e\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\} - \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\})), \end{aligned}$$

con lo que se obtiene $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_1)_{2,3}$. Por otro lado usando el miembro derecho del $(\mathbf{ALG}_1)_1$, se tiene que $\mathcal{A}(\boldsymbol{\alpha}) = \{\mathcal{A}^e(\boldsymbol{\alpha}_e)\}$ y que $\mathcal{A}^e(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{A}^e \boldsymbol{\beta} + \partial I_{\mathbf{K}_{\hat{\mathbf{u}}_{nhe}}}(\boldsymbol{\beta}) - \mathbf{f}^e, \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathfrak{R}^{nhe}$, entonces,

$$\mathcal{A}^e(\boldsymbol{\alpha}^{m+1}) = \{\mathcal{A}^e(\boldsymbol{\alpha}_e^{m+1})\} = \left\{ \mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} + \partial I_{\mathbf{K}_{\hat{\mathbf{u}}_{nhe}}}(\boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}) - \mathbf{f}^e \right\}, \quad \forall \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \in \mathfrak{R}^{nhe}, \quad (\mathbf{A8})$$

por lo que,

$$r\mathbf{\Lambda}^T \mathbf{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}^{m+1} = r\mathbf{\Lambda}^T (\{\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}, \{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}) = r \{\mathbf{L}^{eT} (\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}) + \mathbf{T}^{eT} (\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1})\}. \quad (\text{A9})$$

Para el miembro izquierdo de $(\mathbf{ALG}_1)_1$, se tiene que,

$$\begin{aligned} -\mathbf{\Lambda}^T (\boldsymbol{\lambda}_m^* - \text{Prox}_{r\mathbf{G} \circ (1/r)\mathbf{I}}(\boldsymbol{\lambda}_m^* + r\mathbf{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}^m)) &= -\mathbf{\Lambda}^T [(\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\}) \\ &\quad - \text{Prox}_{r\mathbf{G} \circ (1/r)\mathbf{I}}(\{\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\}\} + r(\{\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m\}, \{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m\}))] \\ &= -\mathbf{\Lambda}^T [(\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\}) - (-r\{\mathbf{q}^e\}, \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m\}))], \\ &= -\mathbf{\Lambda}^T [(\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\} + r\{\mathbf{q}^e\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\} - \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m\}))], \\ &= \{-\mathbf{L}^{eT} (\boldsymbol{\lambda}_e^m + r\mathbf{q}^e) - \mathbf{T}^{eT} (\boldsymbol{\pi}_e^m - \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m\}))\}. \end{aligned} \quad (\text{A10})$$

Recordando que hemos partido de $(\mathbf{ALG}_1)_1$ por lo que tenemos que $(\text{A10}) \in [(\text{A8}) + (\text{A9})]$ de donde se obtiene que,

$$\begin{aligned} &\{-\mathbf{L}^{eT} (\boldsymbol{\lambda}_e^m + r\mathbf{q}^e) - \mathbf{T}^{eT} (\boldsymbol{\pi}_e^m - \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m\}))\} \in \\ &r \{\mathbf{L}^{eT} (\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}) + \mathbf{T}^{eT} (\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1})\} + \{\mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} + \partial I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}(\boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}) - \mathbf{f}^e\}, \quad \forall \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \in \mathfrak{R}^{n_{he}} \\ &\Leftrightarrow \\ &\{-\mathbf{L}^{eT} (\boldsymbol{\lambda}_e^m + r\mathbf{q}^e) - \mathbf{T}^{eT} (\boldsymbol{\pi}_e^m - \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}}(\{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m\}))\} - \{\mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} - \mathbf{f}^e\} \\ &-r \{\mathbf{L}^{eT} (\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}) + \mathbf{T}^{eT} (\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1})\} \in \partial I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}(\boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}), \quad \forall \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \in \mathfrak{R}^{n_{he}}, \end{aligned}$$

si denotamos por \mathcal{B}_1 el lado izquierdo de la anterior pertenencia entonces tenemos lo siguiente,

$$\mathcal{B}_1 \in \partial I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}(\boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}), \quad \forall \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \in \mathfrak{R}^{n_{he}},$$

por lo que de la definición de subdiferencial dada en (36),

$$\begin{aligned} I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}(\boldsymbol{\beta}) &\geq I_{\mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}}}(\boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}) + \mathcal{B}_1 \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}} \\ &0 \geq \mathcal{B}_1 \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{\hat{u}_{nhe}} \\ \Leftrightarrow 0 &= \mathcal{B}_1 \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0he}. \end{aligned}$$

Ya que \mathbf{K}_{0he} es el subespacio de condiciones Neumann discretas cero, relación (58). Entonces substituyendo la definición de \mathcal{B}_1 en esta última relación se tiene que,

$$\begin{aligned}
& \left[\{-\mathbf{L}^{eT} (\boldsymbol{\lambda}_e^m + r\mathbf{q}^e) - \mathbf{T}^{eT} (\boldsymbol{\pi}_e^m - \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}} (\{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m\}))\} - \{\mathbf{A}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} - \mathbf{f}^e\} \right. \\
& \quad \left. - r \{\mathbf{L}^{eT} (\mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}) + \mathbf{T}^{eT} (\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1})\} \right] \cdot \boldsymbol{\beta} = 0, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0he} \\
& \Leftrightarrow \\
& (\mathbf{A}^e + r\mathbf{L}^{eT} \mathbf{L}^e + r\mathbf{T}^{eT} \mathbf{T}^e) \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} \cdot \boldsymbol{\beta} = \mathbf{f}^e \cdot \boldsymbol{\beta} - \mathbf{L}^{eT} (\boldsymbol{\lambda}_e^m + r\mathbf{q}^e) \cdot \boldsymbol{\beta} \\
& \quad - \mathbf{T}^{eT} (\boldsymbol{\pi}_e^m - \text{Proy}_{\mathbf{Q}_{Nh}} (\{\boldsymbol{\pi}_e^m\} + r\{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^m\})) \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{K}_{0he},
\end{aligned}$$

con lo que se concluye la deducción de $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_1)_1$, y por tanto la de $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_1)$. La deducción de los algoritmos $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_2)$ y $(\widetilde{\mathbf{ALG}}_3)$ es similar. \square

Deducción de la formulación (MTP). Integrando la primera inecuación de (65) sobre Ω se obtiene lo siguiente,

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} - \text{div} \{\mathbf{D}\nabla c\} + \mathbf{u} \cdot \nabla c + dc \right\} \{v - c\} + \int_{\Omega} \{\phi(\mathbf{x}, t; v) - \phi(\mathbf{x}, t; c)\} \geq \int_{\Omega} f \{v - c\}, \forall v \in K(t).$$

Donde la integral del término $\text{div}(\mathbf{D}\nabla c) \{v - c\}$ puede ser expresada de la siguiente manera,

$$\begin{aligned}
- \int_{\Omega} \text{div}(\mathbf{D}\nabla c) \{v - c\} &= - \int_{\Omega} \text{div}(\mathbf{D}\nabla c \{v - c\}) + \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla c \cdot \{\nabla v - \nabla c\} \\
&= - \int_{\partial\Omega} \mathbf{D}\nabla c \cdot \mathbf{n} \{\gamma v - \gamma c\} + \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla c \cdot \{\nabla v - \nabla c\}.
\end{aligned}$$

Donde se usa el teorema de la divergencia y el hecho de que $\text{div}(\mathbf{D}\nabla c \{v - c\}) = \{v - c\} \text{div}(\mathbf{D}\nabla c) + \mathbf{grad} \{v - c\} \cdot (\mathbf{D}\nabla c)$. Por otra parte, también integrando (65)₂ sobre las fronteras Dirichlet y Neumann, se obtiene lo siguiente,

$$\int_{\partial\Omega} \{\psi(\cdot; \gamma v) - \psi(\cdot; \gamma c)\} \geq - \int_{\partial\Omega} \mathbf{D}\nabla c \cdot \mathbf{n} \{\gamma v - \gamma c\}, \quad \forall \gamma v(\mathbf{x}, t) \in K(t).$$

Uniendo los tres resultados anteriores y agregando la condición inicial, se obtiene (MTP). \square

Deducción de la formulación (MTM). Para obtener la formulación variacional mixta de control interno dualizado se combinan las inecuaciones (65)_{D,N} y (69)₁. Por lo que efectuando las correspondientes integrales sobre $\partial\Omega$ en (65)_{D,N} se obtiene que,

$$\int_{\partial\Omega} \{\psi(\cdot; \gamma v) - \psi(\cdot; \gamma c)\} \geq \int_{\partial\Omega} \{-\mathbf{D}\nabla c \cdot \mathbf{n}\} \{\gamma v - \gamma c\}, \quad \forall v \in K_{\mathcal{D}(\psi)}(t),$$

pero con el uso de la definición del campo dual λ^* , indicado en (67)₁, se tiene que,

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega} \{\mathbf{D}\nabla c \cdot \mathbf{n}\} \{\gamma v - \gamma c\} &= \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{D}\nabla c) \{v - c\} + \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla c \{\nabla v - \nabla c\} \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c + dc \right\} \{v - c\} + \int_{\Omega} \mathbf{D}\nabla c \{\nabla v - \nabla c\} + \int_{\Omega} \{\lambda^* - f\} \{v - c\}, \forall v \in K_{\mathcal{D}(\psi)}(t). \end{aligned}$$

Ahora, efectuando la integral sobre Ω de la expresión (69)₁, se obtiene que,

$$\int_{\Omega} \{\phi^*(\cdot; \eta^*) - \phi^*(\cdot; \lambda^*)\} \geq \int_{\Omega} c \{\eta^* - \lambda^*\}, \quad \eta^* \in S_{\mathcal{D}(\phi^*)}(t).$$

Por lo que combinando las tres últimas relaciones y agregando la condición inicial se concluye la formulación (MTM). \square

Deducción de las formulaciones (MTP_h) y (MTM_h). Primeramente se obtiene la versión semidiscreta de elemento finito de las formulaciones (MTP) y (MTM), para lo que se definen las funciones base de los subespacios de dimensión finita que determinan los campos admisibles de solución $V_h \subset H^1(\Omega)$ y $W_h \subset L^2(\Omega)$, ecuación (71). Donde V_h y W_h es una familia de subespacios de dimensión finita de parámetro $h > 0$ y dimensión $m_h \rightarrow \infty$ y $r_h \rightarrow \infty$, respectivamente, cuando $h \rightarrow 0$. Si se expande la solución aproximada c_{he} y la variación v_{he} , así como al campo dual λ_{he}^* y su variación η_{he}^* tal y como están definidos en (72) y se substituyen en (MTP) y (MTM), luego de reagrupar términos, se obtienen las siguientes desigualdades variacionales,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para } t \in (0, T); \text{ dado } f(t) \in L^2(\Omega) \text{ encuentre } \boldsymbol{\alpha}(t) \in K^{m_h}(t) : \\ \{\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}'(t) + \mathbf{B}\boldsymbol{\alpha}(t) + \mathbf{C}(t)\boldsymbol{\alpha}(t) + \mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}(t)\} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t)\} + \Phi(t; \boldsymbol{\beta}) - \Phi(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) \\ \quad + \Psi(t; \boldsymbol{\beta}) - \Psi(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) \geq \mathbf{f}(t) \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t)\}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in K^{m_h}(t) \\ \text{con } c_h(\mathbf{x}, 0) = c_{0h}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{array} \right. \quad (\text{A11})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para } t \in (0, T); \text{ encuentre } \{\boldsymbol{\alpha}(t), \boldsymbol{\xi}(t)\} \in J^{m_h}(t) \times \mathfrak{R}^{r_h} : \\ \{\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}'(t) + \mathbf{B}\boldsymbol{\alpha}(t) + \mathbf{C}(t)\boldsymbol{\alpha}(t) + \mathbf{D}\boldsymbol{\alpha}(t)\} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t)\} + \Psi(t; \boldsymbol{\beta}) - \Psi(t; \boldsymbol{\alpha}(t)) \\ \quad \geq \{\mathbf{f}(t) - \mathbf{E}\boldsymbol{\xi}(t)\} \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t)\}, \quad \forall \boldsymbol{\beta} \in J^{m_h}(t) \\ \Phi^*(t; \boldsymbol{\delta}) - \Phi^*(t; \boldsymbol{\xi}(t)) \geq \mathbf{E}^T \boldsymbol{\alpha}(t) \cdot \{\boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{\xi}(t)\}, \quad \forall \boldsymbol{\delta} \in \mathfrak{R}^{r_h} \\ \text{con } c_h(\mathbf{x}, 0) = c_{0h}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{array} \right. \quad (\text{A12})$$

Donde $K^{m_h}(t)$ es la versión \mathfrak{R}^{m_h} de $K_h(t)$; y $J^{m_h}(t)$ es la versión \mathfrak{R}^{m_h} de $J_h(t)$. Las entradas de las matrices y vectores participantes estan definidas en (73).

Finalmente las entradas A_{ij} de la matriz \mathbf{A} se deducen, de la primera integral de $(\mathbf{MTP})_1$ y la expansión de c_{he} y v_{he} dada en $(72)_1$, de la siguiente manera,

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial t}(\mathbf{x}, t) \{v(\mathbf{x}) - c(\mathbf{x}, t)\} d\Omega &= \int_{\Omega} \sum_{i=1}^{m_h} \frac{d}{dt} [\alpha_i(t)] \varphi_i(\mathbf{x}) \left\{ \sum_{j=1}^{m_h} \beta_j \varphi_j(\mathbf{x}) - \sum_{k=1}^{m_h} \alpha_k(t) \varphi_k(\mathbf{x}) \right\} d\Omega \\
&= \sum_{i=1}^{m_h} \frac{d}{dt} [\alpha_i(t)] \int_{\Omega} \varphi_i(\mathbf{x}) \left\{ \sum_{j=1}^{m_h} [\beta_j - \alpha_j(t)] \varphi_j(\mathbf{x}) \right\} d\Omega \\
&= \sum_{i=1}^{m_h} \sum_{j=1}^{m_h} \alpha'_i(t) [\beta_j - \alpha_j(t)] \int_{\Omega} \varphi_j(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}) d\Omega \\
&= \mathbf{A} \boldsymbol{\alpha}'(t) \cdot \{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}(t)\}; \quad \text{donde} \quad \frac{d}{dt} [\alpha_i(t)] \equiv \alpha'_i(t).
\end{aligned}$$

Que se corresponde con el primer término de la relación $(A11)_1$. La matriz \mathbf{A} tiene las entradas definidas en $(73)_1$ y los vectores $\boldsymbol{\alpha}(t)$ y $\boldsymbol{\beta}$ son las componentes de c_{he} y v_{he} , respectivamente, en términos de la base de elemento finito definida en (71); mientras que $\boldsymbol{\alpha}'(t)$ es la derivada de $\boldsymbol{\alpha}(t)$ en el tiempo. Las entradas \mathbf{B} , \mathbf{C} , \mathbf{D} , \mathbf{E} y \mathbf{f} se derivan de manera similar. Finalmente, para obtener la versión discreta, lo que resta es aproximar, en las inecuaciones (A11) y (A12) la derivada en el tiempo y al propio vector $\boldsymbol{\alpha}(t)$, mediante un esquema θ , tal y como se establece en (74), con lo que finalmente se obtienen las formulaciones discretas (\mathbf{MTP}_h) y (\mathbf{MTM}_h) . \square

21 Referencias

- Abriola, L.M. y G.F. Pinder. 1985. **A multiphase approach to the modeling of porous media contamination by organic compounds: I. Equation development.** Water Resources Research, vol. 21, núm. 1.
- Alduncin, G. 1983. **Convergent internal approximations of elliptic variational inequalities.** Inédito, comunicación personal.
- Alduncin, G. 1986. **Formulación subdiferencial y variacional de problemas de valores sobre la frontera.** Com. Téc. Instituto de Geofísica, UNAM, Serie Inv., núm. 4.
- Alduncin, G. 1987. **Duality and variational principles of potential boundary value problems.** Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, North-Holland, vol. 64.
- Alduncin, G. 1989. **Subdifferential and variational formulations of boundary value problems.** Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, North-Holland, vol. 72.
- Alduncin, G. 1996. **Numerical resolvent methods for constrained problems in mechanics.** Approx. Theory and its Appl., vol. 12, núm. 4.
- Alduncin, G. 1997. **On Gabay's algorithms for mixed variational inequalities.** Applied Mathematics and Optimization, vol. 35.
- Alduncin, G. 1998. **Numerical resolvent methods for macro-hybrid mixed variational inequalities.** Numer. Funct. Anal. And Optimiz., vol. 19.
- Alduncin, G. y J. Carrera. 1991. **Upwind finite element approximations of the advection-diffusion problem.** S. Gómez et al. (eds.). Ad. in Num. Partial Differential Equations and Optimization, SIAM Philadelphia.
- Alduncin, G. y N. Vera-Guzmán. 2003. **Parallel proximal-point algorithms for mixed finite element models of flow in the subsurface.** Int. J. Numer. Meth. Engng.
- Amyx, J.W., D.M. Bass Jr. y R.L. Whiting. 1960. **Petroleum reservoir engineering, physical properties.** McGraw-Hill, N.Y.
- Antoncev, S. 1972. **On the solvability of boundary value problems for degenerate two-phase porous flow equations.** (en ruso). Dinamika Splošnoj Sredy Vyp., vol. 10.
- Apostol, T.M. 1965. **Calculus. Vol. II.** Blaisdell Publishing Co. N.Y.
- Arbogast, T. 1992. **Two-phase incompressible flow in a porous medium with various nonhomogeneous boundary conditions.** Nonlin. Analysis: Theory, Methods and Appl., vol. 19.
- Arbogast, T., L.C. Cowsar, M.F. Wheeler e I. Yotov. 2000. **Mixed finite element methods on nonmatching multiblock grids.** SIAM Journal of Numerical Analysis, vol. 37.

- Aziz, K. y A. Settari. 1979. **Petroleum reservoir simulation**. Applied Science Publishers Ltd., London.
- Baehr, A.L. 1987. **Selective transport of hydrocarbons in the unsaturated zone due to aqueous and vapor phase partitioning**. Water Resources Research, vol. 23, núm. 10.
- Bear, J. 1972. **Dynamics of fluids in porous media**. American Elsevier, N.Y.
- Bear, J. y A. Verruijt. 1987. **Modeling groundwater flow and pollution**. D. Reidel, Dordrecht.
- Bear, J., D. Zaslavsky y S. Irmay. 1968. **Physical principles of water percolation and seepage**. UNESCO, Paris.
- Ben Belgacem F. 1999. **The mortar finite element method with Lagrange multipliers**. Numerische Mathematik.
- Binning, P. y M.A. Celia. 1996. **Practical application of the fractional flow approach to multi-phase flow simulation**. Computational Methods in Water Resources XI, vol. 1.
- Brezis, H. 1973. **Opérateurs maximaux monotones**. North-Holland, Amsterdam.
- Brezzi, F. y M. Fortin. 1991. **Mixed and hybrid finite element methods**. Springer-Verlag, N.Y.
- Brooks, R.H. y A.T. Corey. 1964. **Hydraulic properties of porous media**. Hydrology Papers, Colorado State Univ., Fort Collins, CO.
- Buckley, S.E. y M.C. Leverett. 1942. **Mechanisms of fluid displacement in sands**. Trans. AIME, vol. 146.
- Burdine, N.T. 1953. **Relative permeability calculations from pore-size distribution data**. Trans. A.I.M.E. Petrol., vol. 198.
- Camacho, R.G. e I. Herrera. 1996. **A consistent black-oil model with variable bubble-point**. Computational Methods in Water Resources XI, vol. 1.
- Celia, M.A. y P. Binning. 1992. **Multiphase models of unsaturated flow: approaches to the governing equations and numerical methods**. Russell et al. (eds.). Proc. IX Intl. Conf. Comp. Meth. In Water Resources, Elsevier, vol. 2.
- Celia, M.A., T.F. Russell, I. Herrera y R.E. Ewing. 1990. **An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation**. Advances in Water Resources, vol. 13.
- Chavent, G. y J. Jaffré. 1986. **Mathematical models and finite elements for reservoir simulation**. North-Holland, Amsterdam.
- Chen, Z. 1996. **Formulation of three-phase flow in porous media**. Computational Methods in Water Resources XI, vol. 1.

- Chen, Z., Guan Qin y R.E. Ewing. 2000. **Analysis of a compositional model for fluid flow in porous media**. SIAM Journal of Applied Mathematics, vol. 60.
- Chen, Z., M. Espedal y R.E. Ewing. 1995. **Continuous-time finite element análisis of multiphase flow in groundwater hydrology**. Applications of Mathematics, vol. 40.
- Chen, Z., R.E. Ewing y M. Espedal. 1994. **Multiphase flow simulation with various boundary conditions**. A. Peters et al. (eds.). Computational Methods in Water Resources, Kluwer Academic Publishers, Netherlands, vol. 2.
- Chen, Z. y J. Douglas Jr. 1995. **Modelling compositional flow in naturally fractured reservoirs**. M.F. Wheeler (ed.). Environmental Studies: Mathematical, Computational and Statistical Analysis, The IMA Volumes in Mathematics and its Applications, Springer Verlag, Berlin y N.Y., vol. 79.
- Chen, Z. y R.E. Ewing. 1997. **From single-phase to compositional flow: applicability of mixed finite elements**. Transport in Porous Media, vol. 57.
- Chen, Z. y R.E. Ewing. 1998. **Comparison of various formulations for three-phase flow in porous media**. J. of Comp. Physics.
- Ciarlet, P.G. 1976. **The finite element method for elliptic problems**. North-Holland Co., N.Y.
- Constantz, J. 1982. **Temperature dependence of unsaturated hydraulic conductivity of two soils**. Soil Science Society of America Journal, vol. 46, núm. 3.
- Corey, A.T. 1954. **The interrelation between gas and oil relative permeabilities**. Producer's Monthly, vol. 19, núm. 1.
- Corey, A.T. 1986. **Mathematics of immiscible fluids in porous media**. Water Resources Publication, Littleton, CO.
- Croisé, J. y R. Helmig. 1995. **Numerische modellierung von NAPL-infiltrationsvorgängen in lockergesteinen**. Technical Report 95/1 (HG 215), Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart.
- Dahle, H.K. 1988. **Adaptive characteristic operator splitting techniques for convective dominated diffusion problem in one and two dimensions**. Report No. 85, Dept. of Applied Mathematics, University of Bergen, Bergen, Norway.
- Dahle, H.K., M.S. Espedal y O. Saevareid. 1992. **Characteristic, local grid refinement techniques for reservoir flow problems**. Int. J. Num. Mech. Engrg., vol. 34.
- Dahle, H.K. y T.F. Russell. 1995. **Eulerian-Lagrangian localised adjoint methods for a nonlinear advection-diffusion equation**. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., vol. 22.

- Douglas, J. 1983. **Finite difference method for two-phase incompressible flow in porous media**. SIAM J. of Num. Anal., vol. 20, núm. 4.
- Douglas, J., R. Ewing y M. Wheeler. 1983. **The approximation of the pressure by a mixed method in the simulation of miscible displacement**. RAIRO Anal. Numer., vol. 17.
- Dracos, Th. 1978. **Theoretical considerations and practical implications on the infiltration of hydrocarbons in aquifers**. In Proc. IAH Int. Symposium on Ground Water Pollution by Oil Hydrocarbons.
- Dracos, Th. y F. Stauffer (eds.). 1994. **Transport and reactive processes in aquifers**. A.A. Balkema, Rotterdam.
- Duvaut, G. y J.L. Lions. 1972. **Les inéquations en mécanique et en physique**. Dunod, Paris.
- Ekeland, I. y R. Teman. 1974. **Analyse convexe et problèmes variationnels**. Dunod, Gauthier-Villars, Paris.
- El-Kadi, A.I., O.A. Elnawawy, P.K. Kobe y P.K.M. van der Heijde. 1991. **Modeling multiphase flow and transport**. IGWMC Ground-Water Modeling Publications.
- Espedal, M.S. y R.E. Ewing. 1987 **Characteristic Petrov-Galerkin methods subdomain methods for two-phase immiscible flow**. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., vol. 64.
- Ewing, R.E. (ed.). 1983. **The mathematics of reservoir simulations**. SIAM, Philadelphia.
- Ewing, R.E. 1995. **Multiphase flows in porous media**. A.S. Aleskseev and N.S. Bakhvalov (eds.). Advanced Mathematics: Computations and Applications, NCC Publishers, Novosibirsk, Russia.
- Ewing, R.E. 1996. **Three-phase flow formulations**. Computational Methods in Water Resources XI, vol. I.
- Ewing, R.E., M.S. Espedal y R.C. Sharpley. 1993. **Contaminant transfer simulation of unsaturated and multiphase flows in porous media**. S. Wang (ed.). Advances in Hydro-Science and Engineering, University of Mississippi Press, vol. 1, Part B.
- Ewing, R.E. y M.A. Celia. 1990. **Multiphase flow simulation in ground-water hydrology and petroleum engineering**. G. Gambolati (ed.). Computational Methods in Subsurface Hydrology, Computational Mechanics Publications, Boston.
- Falta, R.W. 1990. **Multiphase transport of organic chemical contaminants in the subsurface**. PhD. thesis, University of California, Berkeley.
- Faust, C.R. 1985. **Transport of immiscible fluids within and below the unsaturated zone: a numerical model**. Water Resources Research, vol. 21, núm. 4.

- Fetter, C.W. 1993. **Contaminant hydrogeology**. Macmillan Publishing Co., N.Y.
- Forsyth, P.A. 1993. **A positivity preserving method for simulation of steam injection for NAPL site remediation**. Advances in Water Resources, vol. 6.
- Freeze, R.A. y J.A. Cherry. 1979. **Groundwater**. Prentice-Hall, Inc.
- Fritz, J. 1982. **Partial differential equations**. Springer-Verlag, N.Y.
- Gabay, D. 1982. **Application de la méthode des multiplicateurs aux inéquations variationnelles**. Fortin M. y Glowinski R. (eds.). Méthodes de Lagrangien Augmenté, Dunods-Bordas, Paris.
- Glowinski, R. 1984. **Numerical methods for nonlinear variational problems**. Springer-Verlag, N.Y.
- Glowinski, R., J.L. Lions y R. Trémolières. 1981. **Numerical analysis of variational inequalities**. North-Holland, Amsterdam.
- Green, R.E., L.R. Ahuja y S.K. Chong. 1986. **Hydraulic conductivity, diffusivity, and sorptivity of unsaturated soils: field methods**. A. Klute (ed.). Methods of Soil Analysis, vol. 1. Physical and Mineralogical Methods, Agronomy, Madison, Wis.: American Society of Agronomy, vol. 9, núm. 1.
- Grimal, P. (ed.). 1966. **Mitologías**. Tomos I-II. Pala, S.A.
- Gorelick, S.M., R.A. Freeze, D. Donohue y J.F. Keely. 1993. **Groundwater contamination. Optimal capture and containment**. Lewis Publishers.
- Gurtin, M.E. 1981. **An introduction to continuum mechanics**. Academic Press.
- Hansen, R., M.S. Espedal y O. Nygaard. 1992. **An operator splitting technique for two-phase immiscible flow dominated by gravity and capillary forces**. Russell et al. (eds.). Proc. IX Intl. Conf. Meth. In Water Resources, Elsevier, vol. 1.
- Helmig, R. 1997. **Multiphase flow and transport processes in the subsurface. A contribution to the modeling of hydrosystems**. Springer-Verlag, N.Y.
- Huan, G.R. 1985. **A flash black oil model**. Paper SPE 13521, SPE Middle East Oil Technical Conference and Exhibition, Bahrain.
- Ikeda, T. 1983. **Maximum principle in finite element models for convection-diffusion phenomena**. Lecture notes in Num. Appl. Anal. North-Holland/Kinokuniya, Amsterdam/Tokyo.
- Kalaydjian, F.J.M., J.C. Moulu, O. Vizika y P.K. Munkerund. 1993. **Three-phase flow in water-wet porous media: determination of gas/oil relative permeabilities under various spreading conditions**. Society of Petroleum Engineers.

- Kaluvarachchi, J. y J.C. Parker. 1988. **An efficient finite element method for modeling multiphase flow in porous media.** Water Resources Research, vol. 25, núm. 1.
- Klute, A. y C. Dirksen. 1986. **Hydraulic conductivity and diffusivity: laboratory methods.** A. Klute (ed.). Methods of Soil Analysis, vol. 1. Physical and Mineralogical Methods, Agronomy, Madison, Wis.: American Society of Agronomy, vol. 9, núm. 1.
- Kobus, H. (ed.). 1992. **Schadstoffe im grundwasser; band 1: wärme-und schadstofftransport im grundwasser.** VCH, Weinheim.
- Kobus, H., G. Barczewski y H.P. Koschitzky (eds.). 1996. **Groundwater and subsurface remediation.** Environmental Engineering. Springer-Verlag, Berlin.
- Kobus, H. y W. Kinzelbach (eds.). 1989. **Contaminant transport in groundwater.** A.A. Balkema, Rotterdam, Brookfield.
- Langlo, P. y M.S. Espedal. 1994. **Macrodispersion for two-phase, immiscible flow in porous media.** Advances in Water Resources, vol. 17, núm. 5.
- Lenhard, R.J., T.G. Johnson y J.C. Parker. 1993. **Experimental observations of nonaqueous-phase liquid subsurface movement.** Journal of Contaminant Hydrology, vol. 24.
- Lenhard, R.J. y J.C. Parker. 1987. **A model for hysteric constitutive relations governing multiphase flow 2. Permeability-saturation relations.** Water Resources Research, vol. 23, núm. 12.
- Lenhard, R.J. y J.C. Parker. 1988. **Experimental validation of the theory of extending two-phase saturation-pressure relation to three-phase systems for monotonic drainage paths.** Water Resources Research, vol. 24, núm. 3.
- Leverett, M.C. y W.B. Lewis. 1941. **Steady flow of gas-oil-water mixtures through unconsolidated sands.** Trans. SPE of AIME, vol. 142.
- Lin, C., G.F. Pinder y E.F. Wood. 1982. **Water resources program report 83-WR-2.** Water Resources Program. Princeton, New Jersey. Princeton University.
- Marquardt, D.W. 1963. **An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters.** SIAM J. Appl. Math., vol. 11.
- Marsden, J.E. y T.J.R. Hughes. 1983. **Mathematical foundations of elasticity.** Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- Martínez Nájera, J.D. 1992. **Simulación numérica de problemas de control asociados a la ecuación hiperbólico-parabólica de advección difusión.** Tesis de Maestría. Instituto de Geofísica, UNAM.

- Martínez Nájera, J.D. 2002. **Diseño de algoritmos para su uso en el control de solutos en acuíferos contaminados**. Ingeniería Hidráulica en México, vol. XVII, núm. 2, abril-junio.
- Martínez Nájera, J.D., P. Talamantes y C.F. Ibarra. 2005. **Sistemas hidrológicos acoplados con esquemas de optimización**. Revista de Matemáticas Aplicadas, núm. 20, mayo.
- McWhorter, D.B. y D.K. Sunada. 1990. **Exact integral solutions for two phase flow**. Water Resources Research, vol. 26, núm. 3.
- Morel Seytoux, H.J. 1973. **Two-phase flows in porous media**. V.T. Chow (ed.). Advances in Hydroscience.
- Morel Seytoux, H.J. y J.A. Billica. 1985. **A two-phase numerical model for prediction of infiltration: case of an impervious bottom**. Water Resources Research, vol. 21, núm. 9.
- Morel Seytoux, H.J. y J.A. Billica. 1988. **A two-phase numerical model for prediction of infiltration: applications to a semi-infinite soil column**. Water Resources Research, vol. 21, núm. 4.
- Mualem, Y. 1976. **A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media**. Water Resources Research, vol. 12.
- Mull, R. 1971. **The migration of oil products in the subsoil with regard to groundwater pollution by oil**. S.H. Jenkins (ed.). Advances in Water Pollution Research.
- Muskat, M. 1934. **Two fluid systems in porous media. The encroachment of water into an oil sand**. Physics, vol. 5.
- Muskat, M. 1937. **Flow of homogeneous fluids through porous media**. McGraw-Hill, N.Y.
- Muskat, M. 1949. **Physical principles of oil production**. McGraw-Hill, N.Y.
- NOM-127-SSA1-1994. Jueves 18 de Enero de 1996. **Salud ambiental, agua para uso y consumo humano-límites permisibles de calidad y tratamientos a que debe someterse el agua para su potabilización**. Diario Oficial de la Federación.
- Pankow, J.F. y J.A. Cherry (eds.). 1996. **Dense chlorinated solvents and other DNAPL's in groundwater**. Waterloo Press, Waterloo.
- Parker, J.C. y R.J. Lenhard. 1987. **A model for constitutive relations governing multi-phase flow in porous media 1. Saturation-pressure relations**. Water Resources Research, vol. 23, núm. 12.
- Paunov, V.N., A. Angelopoulos y V.N. Burganos. 1996. **Lattice-Boltzmann simulation of ideal and nonideal immiscible two-phase flow in porous media**. Computational Methods in Water Resources XI, vol. I.
- Pazy, A. 1979. **Semi-groups of non-linear contractions and their asymptotic behaviour**. Nonlinear Mechanics. Pitman, London.

- Philip, J.R. y D.A. de Vries. 1957. **Moisture movement in porous media under temperature gradients**. EOS Trans. AGU, vol. 38, núm. 2.
- Pirson, S.J. 1958. **Oil reservoir engineering**. McGraw-Hill, N.Y.
- Qin, G. 1995. **Numerical solution techniques for a compositional model**. PhD. thesis, Department of Chemical and Petroleum Engineering, University of Wyoming, Laramie, Wyoming.
- Qin, G., H. Wang, R.E. Ewing y M.S. Espedal. 1996. **Efficient numerical solution techniques for a compositional model**. Iterative Methods in Linear Algebra II, IMACS Series in Comp. Appl. Math. 3, Rutgers University, New Jersey.
- Reddy, J.N. 1986. **Applied functional analysis and variational methods in engineering**. McGraw-Hill.
- Riva Palacio, V. 1981. **México a través de los siglos**. Tomos I-X. Cumbre, S.A.
- Roberts, J.E. y J.M. Thomas. 1991. **Mixed and hybrid methods**. Ciarlet P.G. y Lions J.L. (eds.). Handbook of Numerical Analysis, North-Holland, Amsterdam.
- Rose, W. 1960. **Fluid flow in petroleum reservoirs III. Effect of fluid-fluid interfacial boundary condition**. Geol. Survey Circ., vol. 291.
- Russell, T.F. 1995. **Modeling of multiphase multicontaminant transport in the subsurface**. Reviews of Geophysics, Supplement.
- Scheidegger, A.E. 1960. **The physics of flow through porous media**. Univ. of Toronto Press, Toronto.
- Showalter, R.E. 1977. **Hilbert space methods for partial differential equations**. Pitman, London.
- Simunek, J. y M.Th. van Genuchten. 1996. **Estimating unsaturated soil hydraulic properties from tension disk infiltrometer data by numerical inversion**. Water Resources Research, vol. 32.
- Stone, H.L. 1970. **Probability model for estimating three-phase relative permeability**. Trans. SPE of AIME, vol. 249.
- Stone, H.L. 1973. **Estimation of three-phase relative permeability and residual oil data**. J. Can. Petrol. Technol., vol. 12, núm. 4.
- Temam, R. 1970. **Analyse numérique**. Presses Universitaires de Paris.
- Thomas, L.K., W.B. Lumpkin y G.M. Reheis. 1976. **Reservoir simulation of variable bubble-point problems**. Trans. AIME, vol. 253.
- Unger, A.J.A., P.A. Forsyth y E.A. Sudicky. 1996. **Variable spatial and temporal weighting schemes for use in multi-phase compositional problems**. Advances in Water Resources, vol. 19, núm. 1.

- van Genuchten, M.Th. 1980. **A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils.** Soil Science Society of America Journal, vol. 44.
- Whitaker, S. 1966. **The equations of motion in porous media.** Chem. Eng. Sci., vol. 21.
- Whitaker, S. 1986. **Flow in porous media I: theoretical derivation of Darcy's Law.** Transport in Porous Media, vol. 1.
- Wyllie, M.R. y G.H.F. Gardner. 1958. **The generalized Kozeny-Carman equation II. A novel approach to problems of fluid flow.** World Oil Prod. Sect.