



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

INSTITUTO DE GEOFÍSICA

POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA

MÉTODOS DE DESCOMPOSICIÓN DE DOMINIOS Y ELEMENTOS FINITOS
PARA
FLUJO EN EL SUBSUELO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA

JOSÉ ADOLFO RAMÍREZ SÁNCHEZ

TUTOR: DR. GONZALO ALDUNCIN GONZÁLEZ

MÉXICO, D.F. 2004



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Resumen

En este trabajo se presenta la modelación matemática de los fenómenos de flujo monofásico y miscible en el subsuelo, así como la simulación numérica aplicando descomposición de dominios sin traslape a los problemas antes mencionados. Se utiliza la metodología de subdiferenciales para obtener las formulaciones variacionales globales mixtas y macrohíbridas mixtas. La metodología de resolventes para construir los algoritmos numéricos iterativos consistente con el método de elemento finito. Se simuló numéricamente los dos fenómenos utilizando mallados diferentes en cada subdominio y valores diferentes de r .

Contenido

Capítulos

1 Introducción	1
2 Modelos Físicos de Flujo en Medios Porosos	4
Modelo físico de flujo monofásico.....	4
Modelo físico de flujo miscible.....	5
3 Formulaciones Variacionales Mixtas	7
Formulación variacional del modelo de flujo monofásico.....	8
Formulación variacional primal de desplazamiento miscible.....	9
4 Formulaciones Macrohíbridas Duales	11
Formulación variacional mixta macrohíbrida.....	12
Formulación variacional mixta-primal macrohíbrida.....	13
5 Aproximaciones de Elemento Finito	16
Aproximaciones macrohíbridas mixtas (MHM).....	16
Aproximación del problema (MHM)-(MHP).....	18
6 Algoritmos Iterativos de Punto Próximo	22
Metodología para el problema (MHM _h).....	23
Desarrollo del algoritmo ALG5.....	24
Metodología para el problema (MHM _h)-(MHP _h).....	26
7 Experimentación Numérica	30
Flujo monofásico.....	42
Flujo miscible primer caso.....	47
Flujo miscible segundo caso.....	54
Flujo miscible tercer caso.....	57
8 Conclusiones	34
Referencias	36
Lista de Figuras	40
Figuras	42
Apéndice I: Elementos de Análisis Funcional	60

Capítulo 1

Introducción

La complejidad inherente de los procesos de flujo, que tienen lugar en el medio poroso o fracturado, ha hecho necesario el desarrollo de herramientas que faciliten la labor de los técnicos que trabajan en estos campos. Es por esta razón que, en el presente trabajo, se desarrolla la modelación matemática y computacional de los procesos de flujo monofásico y desplazamiento miscible en un medio poroso heterogéneo con anisotropía y descomposición de dominios. A pesar de que, en la actualidad, se encuentran paquetes de simulación de flujo y transporte, tales como: MODFLOW, MT3D, SUTRA etc. Estos presentan limitaciones, por ejemplo en el MODFLOW, el operador es aproximado por diferencias finitas tridimensionales, los resultados que se obtienen son acoplados con MT3D que trabaja bajo el método de características para simular el transporte, y aunque se puede manejar no homogeneidades y anisotropía, éstos no manejan geometrías irregulares. SUTRA emplea elementos finitos y diferencias finitas tridimensionales y maneja geometrías irregulares, pero no condiciones extremas en el medio y el fluido, tales como fracturas, perturbaciones locales y la gran escala espacial. Estos simuladores no manejan descomposición de dominios.

Aunque estas herramientas sean las más utilizadas, tanto por administraciones públicas como por consultorías privadas, presentan limitaciones cuando se trata de simular computacionalmente sistemas con geometrías generales, multifísica, alta heterogeneidad en los parámetros físicos del medio, redes de fracturas, perturbaciones locales y la gran escala espacial del sistema. La mayoría de los fenómenos físicos en la naturaleza presentan este tipo de características, por lo que es necesario contar con una metodología que permita manejarlos, por ello la elaboración de un modelo matemático que describa el fenómeno de flujo más cerca de la realidad es muy importante. [17-19, 25-27, 29].

Para la solución de problemas reales, como por ejemplo sistemas que presentan multifísica y multiescala, se requiere del uso de matemáticas superiores, tales como análisis funcional y convexo. En este trabajo se presentan los modelos físicos que describen los fenómenos de flujo monofásico y desplazamiento miscible, así como las formulaciones variacionales mixtas y primal globales. Esquemas de elemento finito mixto, algoritmos numéricos tipo Uzawa y dualidad penalización.

Objetivo

Este trabajo es de carácter metodológico y teórico, cuyo objetivo principal es la simulación computacional de los procesos de flujo monofásico y desplazamiento miscible en un medio poroso heterogéneo con anisotropía y descomposición de dominios.

Metodología

Para la realización del objetivo, primeramente, se hacen las formulaciones variacionales mixta-primal y macrohíbridas de las ecuaciones diferenciales parciales tridimensionales con sus condiciones de frontera en términos de subdiferenciales, así como la aplicación de esquemas de elemento finito de Raviart-Thomas de orden cero y algoritmos de punto fijo de dualidad-penalización [1, 5, 8, 9, 10, 15, 17, 23, 28].

La metodología consistió en:

a) Recopilación y análisis de trabajos de investigación desarrollados sobre modelos de flujo monofásico y desplazamiento miscible [2- 4, 6, 7, 14, 17-21, 24, 25, 27- 30].

b) Desarrollo de las formulaciones variacionales mixta-primal globales de las ecuaciones que representan los fenómenos de flujo, con sus condiciones de frontera en forma subdiferencial, así como las formulaciones variacionales macrohíbridas con las condiciones de transmisión dualizadas subdiferencialmente [2- 4, 6, 7, 11-13].

c) Aproximación de las desigualdades variacionales surgidas después de aplicar la metodología de subdiferenciales con esquemas de elemento finito mixto-primal macrohíbrido no conforme [2- 4, 6, 7, 11, 15, 17, 20, 21, 24, 25, 28, 30].

d) Para la solución de las desigualdades variacionales mixta-primal macrohíbridas y discretizadas por elemento finito, se formulan algoritmos numéricos tipo Uzawa y de dualidad penalización, como en los trabajos recientemente realizados en [1-3, 6-9]. Finalmente, se modifican los módulos computacionales desarrollados en códigos Fortran 77 dentro del Programa de Cómputo Científico del Departamento de Recursos Naturales, con mallados de elemento finito automáticos y visualización de resultados realizados con la biblioteca MODULEF.

Para cubrir este trabajo de investigación se desarrollaron los siguientes capítulos .

En el capítulo 2 se plantean los modelos físicos que están representados por un sistema de ecuaciones parciales tridimensionales que describen el movimiento de flujo en un medio poroso, bajo las condiciones y restricciones que se establecen para la simulación de este fenómeno.

En el capítulo 3 se plantean las formulaciones variacionales mixtas en forma global de los modelos físicos, así como la incorporación de las condiciones de frontera de manera general. Todo esto en espacios funcionales de dimensión infinita.

En el capítulo 4 se introducen las formulaciones variacionales macrohíbridas duales, que consiste en partición de operadores y métodos de descomposición de dominios sin traslape.

Las aproximaciones de elemento finito mixto macrohíbrido se formulan en el capítulo 5, en términos de subespacios locales, para mallas que no son conformes en las interfaces.

También se aplican en el capítulo 6 algoritmos iterativos de punto próximo tipo Uzawa y dualidad-penalización, que pueden ser interpretados como esquemas de integración en el tiempo.

Finalmente, en los capítulos 7 y 8 se presentan resultados computacionales que ejemplifican la metodología aplicada para la solución de los modelos de flujo monofásico y desplazamiento miscible, así como las conclusiones.

Capítulo 2

Modelos Físicos de Flujo en Medios Porosos

El agua subterránea se encuentra en continuo movimiento y éste se rige de acuerdo con las leyes y principios de conservación de masa y energía, así como por ecuaciones constitutivas como la ley de Darcy y de estado, que en conjunto describen los procesos básicos.

Los modelos físicos están representados por sistemas de ecuaciones diferenciales tridimensionales, que describen el movimiento y modelan el fenómeno de flujo monofásico y de desplazamiento miscible con sus respectivas condiciones iniciales y de frontera, a través de un medio poroso.

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \in \{1, 2, 3\}$, un dominio acotado, con frontera $\partial\Omega$, y $T > 0$. Ω representa una región particular del subsuelo (figura 2.1), en donde se simulan numéricamente flujo monofásico y desplazamiento miscible, estos están caracterizados por tener campos macroscópicos de velocidad \mathbf{v} , presión p y concentración c . Las propiedades físicas de Ω y también sus dimensiones varían de acuerdo con el fenómeno de flujo que se quiere simular, así como las condiciones de frontera y sus restricciones. Ω es dividida en subdominios (figura 2.2), en los cuales se simulan localmente los fenómenos antes mencionados con sus respectivas condiciones de transmisión de velocidad, presión y concentración. Esto es por la aplicación de técnicas de descomposición de dominios, lo cual permite tratar de manera independiente las propiedades físicas del medio, no homogeneidades, multifísica y multiescala.

Modelo físico de flujo monofásico

En la simulación del flujo monofásico, por ejemplo, si se diera en condiciones isotérmicas, éste sería del tipo Darcy e incompresible [27]. Las ecuaciones constitutivas y de balance de masa que representan este modelo físico y que describen este tipo de movimiento en Ω son:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{K}^{-1}\mathbf{u}(x) &= -\mathbf{grad}p(x) + \rho(x)\mathbf{g} \\ \mathit{div}\mathbf{u}(x) &= \hat{q} \end{aligned} \right\} x \in \Omega, \quad (2.1)$$

donde:

\mathbf{K} es el tensor de movilidad (m^2)

ρ la densidad de masa (kg/m^3),

\mathbf{g} el vector de gravedad (m/s^2),

\hat{q} la razón de flujo volumétrico prescrito (s^{-1}).

Modelo físico de desplazamiento miscible

Otro tipo de modelo físico es el de desplazamiento miscible. En este, el transporte se da, también, en condiciones isotérmicas, permaneciendo el sistema fijo con respecto al marco de referencia inercial; se supone que no existen cambios de volumen como resultado de la mezcla de los solutos participantes. El sistema de ecuaciones diferenciales, que representan este modelo con las características físicas descritas, está dado por las ecuaciones (2.1) acopladas con la de concentración en el dominio espacio tiempo $\Omega \times (0, T)$.

Ecuaciones de velocidad-presión

$$(M) \left\{ \begin{aligned} \mu(c)\mathbf{K}^{-1}\mathbf{u}(x) &= -\mathbf{grad}p(x) + \rho(c)\mathbf{g}, \\ \mathit{div}\mathbf{u}(x) &= \hat{q}; \end{aligned} \right. \quad (2.2)$$

Ecuación de concentración

$$(P) \left\{ \phi \frac{\partial c}{\partial t} - \mathit{div}(\mathbf{D}(\phi, \mathbf{u})\mathbf{grad}c) + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad}c = (\hat{c} - c)\hat{q}. \right. \quad (2.3)$$

donde:

\mathbf{u} denota el campo de velocidad (m/s),

p el campo de presión (Pa),

c la concentración (),

μ el parámetro de viscosidad ($Pa \cdot s$),

ρ la densidad de masa (kg/m^3),

ϕ la porosidad (),

\mathbf{g} el vector de gravedad (m/s^2),

\mathbf{K} el tensor de permeabilidad (m^2),

\mathbf{D} el tensor de difusión-dispersión (m^2/s),

\hat{q} la razón de flujo volumétrico ($1/s$).

\hat{c} la concentración de fluido inyectado ().

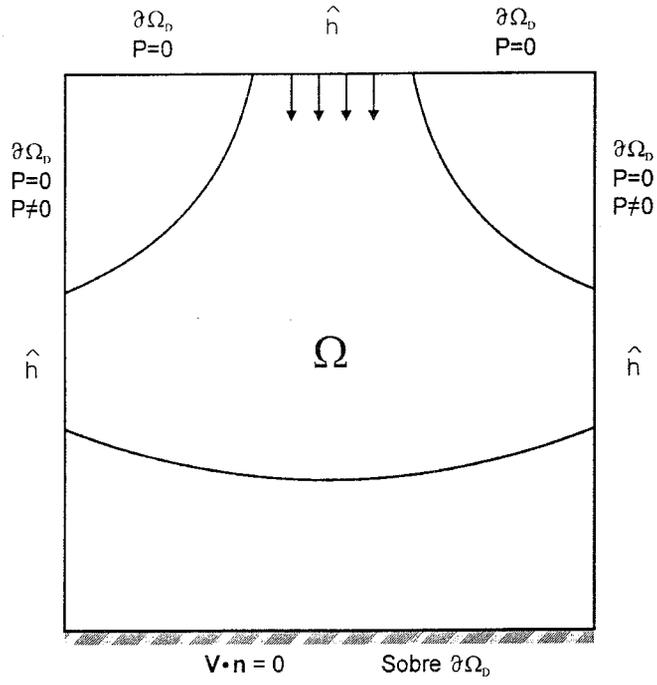


Figura 2.1. Ω dominio particular fijo del subsuelo, donde se simula flujo monofásico y miscible.

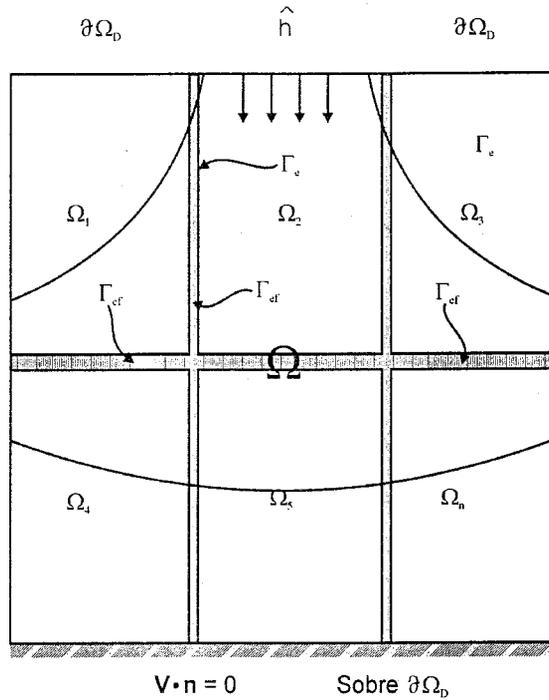


Figura 2.2. Ω_e , familia de subsistemas disjuntos y conexos sin traslape.

Capítulo 3

Formulaciones Variacionales Mixtas

Las formulaciones variacionales de los sistemas físicos, que están representados por ecuaciones diferenciales tridimensionales en el capítulo 2, se hacen en términos de subdiferenciales. El modelo de flujo monofásico es de tipo mixto y consiste en aproximar de manera simultánea los campos de velocidad presión, la velocidad como primal y la presión como dual. El mixto primal es el acoplamiento del modelo monofásico con la ecuación de concentración siendo esta la primal.

Las condiciones de frontera y restricciones del sistema mixto (2.1) se expresan utilizando subdiferenciales, por lo que la interacción del sistema con su exterior se define por medio de la siguiente expresión:

$$p(x) \in \partial\psi_u(x, \mathbf{u}(x) \cdot \mathbf{n}(x)), x \in \partial\Omega. \quad (3.1)$$

Así, las ecuaciones (2.1) describen los campos en el interior y sobre la frontera respectivamente. Aquí $\partial\psi(x, \cdot) : \Re \rightarrow 2^{\Re}$ es un operador subdiferencial monótono que modela en un sentido primal la relación entre flujo, velocidad normal y presión. Por ejemplo, cuando la velocidad normal \hat{u}_n se prescribe sobre una parte de la frontera como condición Neumann:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \hat{u}_n, \quad \text{en } \partial\Omega_N, \quad (3.2)$$

el subdiferencial de frontera es definido por,

$$\partial\psi(x, \xi) = \begin{cases} \Re, & \xi = \hat{u}_n(x), \\ \emptyset, & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (3.3)$$

con el subpotencial $\psi(x, \cdot) : \Re \rightarrow \Re \cup \{+\infty\}$ igual a la función indicatriz:

$$\psi(x, \xi) = I_{\{\hat{u}_n(x)\}} \equiv \begin{cases} 0, & \xi = \hat{u}_n(x), \\ +\infty, & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (3.4)$$

De manera similar se pueden formular, de forma subdiferencial, otros tipos de condiciones de frontera, tales como la prescripción de la presión y la especificación de condiciones mixtas o Robin.

Formulación Variacional del Modelo Monofásico

La formulación variacional del modelo mixto (2.1), y sus condiciones de frontera (3.1), se hace de la siguiente manera: se multiplica por una función de prueba \mathbf{v} , se integra y se aplica el teorema de la divergencia, dando como resultado el siguiente principio variacional del sistema mixto con sus condiciones de frontera expresadas en forma subdiferencial.

Formulación Variacional del Modelo Mixto de Flujo Global.

$$M(\mathbf{u}, \mathbf{p}) = \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\mathbf{u}, \mathbf{p}) \in \mathbf{V}(\Omega) \times Y(\Omega) : \\ \int_{\Omega} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} \psi_u(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \, d\Omega \\ \geq \int_{\partial\Omega} \psi_u(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma + \int_{\Omega} p \operatorname{div}(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \, d\Omega \\ + \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega), \\ - \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{u} q \, d\Omega = - \int_{\Omega} \hat{q} q \, d\Omega \quad \forall q \in V(\Omega). \end{array} \right.$$

Formulación Variacional Mixta-Primal del Modelo de Desplazamiento Miscible

El modelo mixto/primal se define por las ecuaciones (2.2) acopladas con la ecuación de concentración (2.3), que representan el modelo de dos fluidos miscibles e incompresibles en el dominio espacio tiempo, $\Omega \times (0, T)$.

Las condiciones de frontera se expresan por ecuaciones subdiferenciales como (3.1) y la concentración por:

$$-\mathbf{D}(\phi, \mathbf{u}) \operatorname{grad} c(x) \cdot \mathbf{n}(x) \in \partial\psi_c(x, c(x)), \quad x \in \partial\Omega, \quad (3.5)$$

donde $\partial\psi_u(x, \cdot)$, y $\partial\psi_c(x, \cdot)$ son operadores subdiferenciales monótonos. Por ejemplo, cuando la velocidad normal \hat{u}_n y el flujo de masa \hat{g} son prescritos sobre la frontera como

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \hat{u}_n, \quad \text{sobre } \partial\Omega, \quad (3.6)$$

y

$$-\mathbf{D}(\phi, \mathbf{u}) \operatorname{grad} c \cdot \mathbf{n} = \hat{g}, \quad \text{sobre } \partial\Omega \quad (3.7)$$

los subpotenciales de frontera se especializan respecto a los funcionales definidos por

$$\psi_u(x, \xi) = I_{\{\hat{u}_n(x)\}} \equiv \begin{cases} 0, & \xi = \hat{u}_n(x), \\ +\infty, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (3.8)$$

y

$$\psi_c(x, \xi) = \hat{g}(x) \xi, \quad \xi \in \mathfrak{R}. \quad (3.9)$$

Entonces, considerando las ecuaciones de velocidad-presión como un modelo mixto, la velocidad como el campo primal y la presión como el dual, los problemas son formulados variacionalmente y las condiciones de frontera se manejan en forma subdiferencial, dando como consecuencia los siguientes principios variacionales de las ecuaciones (2.2) y (2.3) de forma global.

Problema Variacional Mixto Velocidad-Presión

$$M(c, \mathbf{u}, p) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (\mathbf{u}, p) : (0, T) \rightarrow \mathbf{V}(\Omega) \times Y(\Omega) : \\ \int_{\Omega} \mu(c) \mathbf{K}^{-1} \mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}) d\Omega + \int_{\partial\Omega} \psi_u(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) d\partial\Omega \\ \geq \int_{\partial\Omega} \psi_u(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) d\Omega + \int_{\Omega} p(\operatorname{div} \mathbf{v} - \operatorname{div} \mathbf{u}) d\Omega \\ + \int_{\Omega} \rho(c) g \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}) d\Omega \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega) \\ - \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{u} q d\Omega = - \int_{\Omega} \hat{q} q d\Omega, \quad \forall q \in Y(\Omega); \end{array} \right.$$

Problema de Concentración Variacional Primal

$$P(u, c) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } c : (0, T) \rightarrow V(\Omega) : \\ \int_{\Omega} \phi \frac{\partial c}{\partial t} (d - c) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{D}(\phi, \mathbf{u}) \operatorname{grad} c \cdot (\operatorname{grad} d - \operatorname{grad} c) d\Omega \\ + \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} c (d - c) d\Omega + \int_{\partial\Omega} \psi_c(d) d\partial\Omega \\ \geq \int_{\partial\Omega} \psi_c(c) d\partial\Omega + \int_{\Omega} (\hat{c} - c) \hat{q} (d - c) d\Omega, \quad \forall d \in V(\Omega), \\ c(0) = c_0. \end{array} \right.$$

El marco funcional, donde se plantean las formulaciones variacionales, es definido por los siguientes espacios de velocidad, presión y concentración. Para mayor detalle ver **apéndice I**. $\mathbf{V}(\Omega) = \{\mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(\Omega) : \operatorname{div} \mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(\Omega)\}$, $Y(\Omega) = \mathbf{L}^2(\Omega)$, y $V(\Omega) = H^1(\Omega)$.

Capítulo 4

Formulaciones Macrohíbridas

El esquema macrohíbrido es una extensión de las aproximaciones híbridas clásicas y consiste en descomponer el sistema global en varios subsistemas o subdominios, los cuales interactúan y están sincronizados a través de interfaces por condiciones de transmisión de velocidad normal y presión. La localización permite realizar procesos en paralelo.

Para formular los sistemas de ecuaciones diferenciales del capítulo 2 como sistemas macrohíbridos, se aplica el método de descomposición de dominios.

Debido a las dificultades que se presentan para la simulación computacional de multifísica, por ejemplo, la presencia de alta heterogeneidad y anisotropía en los parámetros físicos del medio, redes de fracturas, perturbaciones locales y la gran escala espacial del sistema, es conveniente utilizar el método de descomposición de dominios como una forma efectiva para tratar esta clase de problemas.

La relación entre el sistema mixto global y el mixto macrohíbrido está dado por el siguiente teorema [5]:

Teorema 1. Si (u, p^*) es una solución del problema mixto (\mathbf{M}) , entonces sus restricciones $(\{u_e\}, \{p_e^*\})$ en los subdominios y sus correspondientes campos duales de frontera interna $\{\lambda_e^* \in \partial I_Q(\{\pi_{\Gamma_e} u_e\})$, conforman una solución del problema mixto macrohíbrido (\mathbf{MH}_M) . Inversamente, si $(\{u_e\}, \{p_e^*\}, \{\lambda_e^*\})$ es una solución del problema mixto macrohíbrido (\mathbf{MH}_M) , entonces sus soluciones locales $(\{u_e\}, \{p_e^*\})$ conforman una solución del problema mixto original (\mathbf{M}) .

Para formular los problemas (2.1) y (2.3), como sistemas macrohíbridos, el dominio Ω se divide en una familia E de subdominios disjuntos y conexos sin traslape:

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{e=1}^E \bar{\Omega}_e, \quad \Omega_e \cap \Omega_f = \emptyset, \quad 1 \leq e < f \leq E, \quad (4.1)$$

con fronteras internas e interfaces definidas por:

$$\begin{aligned} \Gamma_e &= \partial\Omega_e \cap \Omega, \quad 1 \leq e \leq E, \\ \Gamma_{ef} &= \Gamma_e \cap \Gamma_f, \quad 1 \leq e < f \leq E. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Formulación Variacional Mixta Macrohíbrida

El sistema de flujo representado por las ecuaciones (2.1), sobre la región Ω , se transforma en el siguiente conjunto de subproblemas locales en cada uno de los subdominios Ω_e , donde $e = 1, 2, \dots, E$

$$(P_e) \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{K}_e^{-1} \mathbf{u}_e = -grad p_e + \rho_e \mathbf{g}, \\ div \mathbf{u}_e = \hat{q}_e, \\ p_e \in \partial \psi_e(x, \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e), \end{array} \right\} \begin{array}{l} x \in \Omega_e, \\ x \in \partial \Omega_e \setminus \Gamma_e, \end{array} \quad (4.3)$$

y estos están comunicados con las siguientes condiciones de transmisión de continuidad de flujo y de presión, definidos por las ecuaciones:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e = -\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f, \\ p_e = p_f \end{array} \right\} \text{sobre } \Gamma_{ef}, 1 \leq e < f \leq E. \quad (4.4)$$

El marco funcional local, donde se plantean las formulaciones variacionales mixtas macrohíbridas de los campos de velocidad presión se definen por (**Ver apéndice I**): $\mathbf{V}(\Omega_e) = \{\mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(\Omega_e) : div(\mathbf{v}) \in \mathbf{L}^2(\Omega_e)\}$, $Y(\Omega_e) = L^2(\Omega)$, y los de frontera interna de velocidad y presión por: $B(\Gamma_e) = H^{1/2}(\Gamma_e)$ y su dual $B^*(\Gamma_e) = H^{-1/2}(\Gamma_e)$, donde $e = 1, 2, \dots, E$.

Por consiguiente, las condiciones de transmisión (4.4) pueden ser reescritas de la siguiente manera:

$$\left. \begin{array}{l} \{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}\} \in \mathbf{Q}_N = \left\{ \begin{array}{l} \{v_{ne}\} \in \mathbf{B}(\Gamma) = \prod_{e=1}^E B(\Gamma_e) : v_{ne} = -v_{nf} \\ \text{sobre } \Gamma_{ef}, 1 \leq e < f \leq E \end{array} \right\}, \\ \{p_e\} \in \mathbf{Q}_D^* = \left\{ \begin{array}{l} \{q_e\} \in \mathbf{B}^*(\Gamma) = \prod_{e=1}^E B^*(\Gamma_e) : q_e = q_f \\ \text{sobre } \Gamma_{ef}, 1 \leq e < f \leq E \end{array} \right\}, \end{array} \right\} \quad (4.5)$$

y relacionadas por el siguiente lema.

Lema 1 Las condiciones de transmisión(4.5) se caracterizan por las ecuaciones subdiferenciales monótonas primal y dual,

$$\{p_e\} \in \partial I_{\mathbf{Q}_N} (\{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\}) \Leftrightarrow \{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\} \in \partial I_{\mathbf{Q}_D^*} (\{p_e\}). \quad (4.6)$$

Aquí $I_{\mathbf{Q}_N}$ y $I_{\mathbf{Q}_D^*}$ son las funcionales indicatrices asociadas a los subespacios \mathbf{Q}_N y \mathbf{Q}_D^* , de admisibilidad de transmisión primal y dual.

De la formulación dual de las condiciones (4.5), (4.6₂), se introducen los nuevos campos duales de presión de frontera interna

$$r_e = p_e \text{ en } \Gamma_e, 1 \leq e \leq E. \quad (4.7)$$

Una vez definidas las condiciones de frontera interna, se procede a formular el sistema en forma mixta macrohíbrida, para ello se integran las ecuaciones (4.3) y se les aplica la fórmula de Green, obteniéndose, de esta manera, la formulación variacional y las restricciones de frontera en forma subdiferencial.

Formulación Variacional Mixta Macrohíbrida

$$(MHM) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } (u_e, p_e) \in V(\Omega_e) \times Y(\Omega_e), \text{ donde } e = 1, 2, \dots, E \\ \\ \int_{\Omega_e} K_e^{-1} u_e \cdot (v - u_e) d\Omega + \int_{\partial\Omega_e \setminus \Gamma_e} \psi_e (v \cdot n_e) d\partial\Omega \\ \\ \geq \int_{\partial\Omega_e \setminus \Gamma_e} \psi_e (u_e \cdot n_e) d\partial\Omega + \int_{\Omega_e} p_e (\text{div}(v) - \text{div}(u_e)) d\Omega \\ \\ + \int_{\Omega_e} \rho_e g_e \cdot (v - u_e) d\Omega - \int_{\Gamma_e} r_e (v \cdot n_e - u_e \cdot n_e) d\Gamma, \quad \forall v \in V(\Omega_e), \\ \\ \int_{\Omega_e} \text{div}(u_e) q d\Omega = \int_{\Omega_e} \hat{q}_e q d\Omega, \quad \forall q \in Y(\Omega_e), \\ \\ \text{y } \{r_e\} \in Q_D^* \text{ satisfaciendo las condiciones de sincronización} \\ \\ 0 \geq \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma_e} u_e \cdot n_e (s_e - r_e) d\Gamma \quad \forall \{s_e\} \in Q_D^*. \end{array} \right.$$

Esta formulación corresponde a un sistema de velocidad-presión, lo que permite una aproximación más precisa del campo de velocidad, localizado espacialmente en cada subdominio.

Formulación Variacional Mixta Primal Macrohíbrida

Para definir la formulación variacional mixta primal macrohíbrida, se introducen las siguientes condiciones de transmisión de continuidad a través de las interfaces de velocidad normal y presión, para $1 \leq e < f \leq E$,

$$\left. \begin{aligned} \{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}\} \in Q_{N_u} &= \left\{ \{v_{ne}\} \in \prod_{e=1}^E B_u(\Gamma_e) : v_{ne} = -v_{nf} \text{ en } \Gamma_{ef} \right\}, \\ \{p_e\} \in Q_{D_u}^* &= \left\{ \{q_e\} \in \prod_{e=1}^E B_u(\Gamma_e) : q_e = q_f \text{ en } \Gamma_{ef} \right\}, \end{aligned} \right\} \quad (4.8)$$

y de concentración y de flujo de masa,

$$\left. \begin{aligned} \{c_e\} \in Q_{D_c} &= \left\{ \{s_e\} \in \prod_{e=1}^E B_c(\Gamma_e) : s_e = s_f \text{ en } \Gamma_{ef} \right\}, \\ \{-\mathbf{D}_e(\phi_e, \mathbf{u}_e) \text{grad} c_e\} \in Q_{N_c}^* &= \left\{ \{g_e\} \in \prod_{e=1}^E B_c^*(\Gamma_e) : g_e = -g_f \text{ en } \Gamma_{ef} \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (4.9)$$

Ahora como en párrafos anteriores se introdujeron espacios funcionales locales de velocidad-presión y de frontera interna, también se definen los espacios de concentración por: $B_c(\Gamma_e) = H^{1/2}(\Gamma_e)$ y su dual $B_c^*(\Gamma_e) = H^{-1/2}(\Gamma_e)$ como espacios de frontera ambos asociados al espacio local de concentración $V(\Omega_e) = H^1(\Omega_e)$, para $e = 1, 2, 3, \dots, E$. (**Apellido I**)

La formulación variacional de estas condiciones de transmisión son expresadas por el Lema 1, en términos de operadores subdiferenciales de funcionales indicatrices $I_{Q_{N_u}}$, $I_{Q_{D_u}^*}$, $I_{Q_{D_c}}$ y $I_{Q_{N_c}^*}$ de los subespacios de admisibilidad definidos en párrafos anteriores.

$$\{p_e\} \in \partial I_{Q_{N_u}}(\{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\}) \iff \{\mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n}_e\} \in \partial I_{Q_{D_u}^*}(\{p_e\}), \quad (4.10)$$

y

$$\left. \begin{aligned} \{-\mathbf{D}_e(\phi_e, \mathbf{u}_e) \text{grad} c_e \cdot \mathbf{n}_e\} \\ \in \partial I_{Q_{D_c}}(\{c_e\}) \iff \{c_e\} \in \partial I_{Q_{N_c}^*}(\{-\mathbf{D}_e(\phi_e, \mathbf{u}_e) \text{grad} c_e \cdot \mathbf{n}_e\}) \end{aligned} \right\}. \quad (4.11)$$

En consecuencia, los nuevos campos de frontera interna dual de presión y flujo de masa, se definen por las ecuaciones:

$$\left. \begin{aligned} r_e &= p_e, \\ g_e &= -\mathbf{D}_e(\phi_e, \mathbf{u}_e) \text{grad} c_e \cdot \mathbf{n}_e \end{aligned} \right\} \text{ de } \Gamma_e, \quad 1 \leq e \leq E. \quad (4.12)$$

Capítulo 5

Aproximaciones de Elemento Finito

Muchos de los procesos físicos se pueden representar matemáticamente mediante ecuaciones diferenciales parciales, siendo entonces posible resolver problemas complicados con técnicas numéricas.

El método de elemento finito es un método numérico variacional, que surgió formalmente en la década de los 60's y desde entonces ha sido una herramienta necesaria tanto a nivel académico como industrial. Se le ha aplicado con éxito en los campos de la ingeniería y ciencias aplicadas.

El éxito del método también se debe al surgimiento de computadoras más rápidas y con mayor capacidad de almacenamiento y manejo de datos.

El método de elemento finito es una técnica general para construir subespacios de dimensión finita en espacios de Hilbert y Banach V . La idea fundamental es la partición del dominio Ω del problema en un conjunto de simples subdominios, llamados elementos. Estos elementos son usualmente triángulos, cuadriláteros, tetraedros, etc. El espacio V de funciones definidas sobre Ω , es aproximado por simples funciones, definidas en cada subdominio. El método, aquí considerado, está en relación con los principios variacionales y los espacios funcionales.

Aproximación de elemento finito para el problema (MHM)

Para la aproximación del problema macrohíbrido mixto (MHM), en términos de subespacios de elemento finito local y en mallas que, en general, son globalmente no conformes en las interfases de los subdominios, (siendo ésta una propiedad natural de la estructura macrohíbrida dual, la cual facilita el tratamiento de procesos no homogéneos y multiescala) se consideran aproximaciones sobre espacios de elemento finito tipo mixto conforme localmente de dimensión finita de velocidad presión definidos sobre mallas independiente en cada subdominio, expresiones (5.1).

Las matrices, vectores y funcionales están definidos para $i, j = 1, 2, 3, \dots, n_{h_e}$, $m = 1, 2, 3, \dots, m_{h_e}$, $k = 1, 2, 3, \dots, k_{h_e}$, por

$$\begin{aligned}
A_{ij}^e &= \int_{\Omega_e} \mathbf{K}_e^{-1} \boldsymbol{\phi}_{e,j} \cdot \boldsymbol{\phi}_{e,j} d\Omega, \\
\Psi_e(\boldsymbol{\beta}) &= \int_{\partial\Omega_e \setminus \Gamma_e} \psi \left(\sum_{j=1}^{n_{h_e}} \beta_j \boldsymbol{\phi}_{e,j} \cdot \mathbf{n}_e \right) d\partial\Omega, \\
L_{m,j}^e &= \int_{\Omega_e} \zeta_{e,m} \operatorname{div} \boldsymbol{\phi}_{e,j} d\Omega, \\
T_{k,j}^e &= \int_{\Gamma_e} \xi_{e,k} \boldsymbol{\phi}_{e,j} \cdot \mathbf{n}_e d\Gamma_e, \\
f_j^e &= \int_{\Omega_e} \rho_e \mathbf{g}_e \cdot \boldsymbol{\phi}_{e,j} d\Omega, \\
q_k^e &= \int_{\Omega} \hat{q}_e \zeta_{e,k} d\Omega.
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Por otro lado, si las aproximaciones de elemento finito híbridas (5.2) de funciones definidas en las fronteras internas, coinciden en las interfaces, el subespacio discreto de admisibilidad dual de transmisiones $Q_{D_h}^*$ se define de manera natural como la versión discreta del subespacio dual (4.5₂),

$$\mathbf{Q}_{D_h}^* = \left\{ \{ \boldsymbol{\mu}_e \} \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{k_{h_e}} : \sum_{k=1}^{k_{h_e}} \mu_{e,k} \xi_{e,k} = \sum_{k=1}^{k_{h_f}} \mu_{f,k} \xi_{f,k} \text{ sobre } \Gamma_{e,f}, 1 \leq e < f < E \right\} \tag{5.5}$$

En el caso general de aproximaciones híbridas completamente independientes de (5.2) y además no coincidentes en las interfases, en la definición del subespacio de sincronización $Q_{D_h}^*$ se deberían incorporar proyecciones o interpolaciones de funciones de un lado con respecto al otro para implementar la continuidad en la interface.

Aproximación de elemento finito para el problema MHM-MHP

Ahora, se aproxima numéricamente la solución del problema (MHM)-(MHP), en términos de subespacios de elemento finito mixto-primal afín localmente conforme de los espacios locales de velocidad, presión y concentración.

A los espacios locales definidos en (5.1) de velocidad y presión, le agregamos el espacio de concentración

$$\mathbf{W}_{h_e} = [\chi_{e,1}, \chi_{e,2}, \dots, \chi_{e,l_{h_e}}] \subset V(\Omega_e) \}. \quad (5.6)$$

Similarmente, las condiciones de sincronización definidas en las interfaces de las fronteras internas $\{\Gamma_e\}$, son aproximadas de forma independiente por elemento finito híbrido localmente conforme sobre los espacios de frontera interna de presión (5.2) y flujo de concentración,

$$\mathbf{C}_{h_e} = [\zeta_{e,1}, \zeta_{e,2}, \dots, \zeta_{e,d_{h_e}}] \subset L^2(\Gamma_e) \subset B_c^*(\Gamma_e) \}. \quad (5.7)$$

Entonces definimos las aproximaciones de elemento finito de los campos locales por las expresiones,

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u}_{h_e} &= \sum_{j=1}^{n_{h_e}} \alpha_j \phi_{e,j} \in \mathbf{V}_{h_e}, \\ p_{h_e} &= \sum_{k=1}^{m_{h_e}} \lambda_k \psi_{e,k} \in \mathbf{Y}_{h_e}, \\ c_{h_e} &= \sum_{n=1}^{l_{h_e}} \theta_n \chi_{e,n} \in \mathbf{W}_{h_e}, \end{aligned} \right\} \quad (5.8)$$

y los correspondientes campos duales de frontera interna como,

$$\left. \begin{aligned} r_{h_e} &= \sum_{l=1}^{k_{h_e}} \pi_l \xi_{e,l} \in \mathbf{B}_{h_e}, \\ g_{h_e} &= \sum_{d=1}^{d_{h_e}} v_d \zeta_{e,d} \in \mathbf{C}_{h_e}. \end{aligned} \right\} \quad (5.9)$$

Así la versión de elemento finito del problema **MHM-MHP**, está dada en términos de vectores coordenados dependientes del tiempo como sigue.

Formulación Variacional Macrohíbrida Mixta de Velocidad Presión

$$\left. \begin{aligned}
 & \text{Encontrar } (\alpha_e, \lambda_e) : (0, T) \rightarrow \mathfrak{R}^{n_{he}} \times \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\
 & \text{para } e = 1, 2, \dots, E : \\
 & \mathbf{K}^e(\theta_e) \alpha_e \cdot (\beta - \alpha_e) + \psi_{u,e}(\beta) \\
 & \geq \psi_{u,e}(\alpha) - \{ \mathbf{L}^{eT} \lambda_e + \mathbf{T}^{eT} \pi_e \} \cdot (\beta - \alpha_e) \\
 & + \mathbf{f}^e(\theta_e) \cdot (\beta - \alpha_e), \quad \forall \beta \in \mathfrak{R}^{n_{he}}, \\
 & \mathbf{L}^e \alpha_e \cdot \mathbf{v} = -\mathbf{q}^e \cdot \mathbf{v}, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\
 & \text{y } \{ \pi_e \} : (0, T) \rightarrow Q_{D\alpha}^* \text{ satisfaciendo las condiciones} \\
 & \text{de sincronización} \\
 & 0 \geq \sum_{e=1}^E \mathbf{T}^e \alpha_e \cdot (\mu - \pi_e), \quad \forall \{ \mu \} \in Q_{D\alpha}^*.
 \end{aligned} \right\} MHM_h(\{\theta_e; \alpha_e, \lambda_e, \pi_e\})$$

Formulación Variacional Macrohíbrida Primal de Concentración

$$\left. \begin{aligned}
 & \text{Encontrar } \theta_e : (0, T) \rightarrow \mathfrak{R}^{l_{he}}, \\
 & \text{para } e = 1, 2, \dots, E : \\
 & \mathbf{M}^e \frac{d\theta_e}{dt} \cdot (\eta - \theta_e) + \{ \mathbf{D}^e(\alpha_e) + \mathbf{A}^e + \mathbf{E}^e \} \theta_e \cdot (\eta - \theta_e) \\
 & + \Psi_{c,e}(\eta_e) \\
 & \geq \Psi_{c,e}(\theta_e) - \mathbf{S}^{eT} \mathbf{v}_e \cdot (\eta - \theta_e) + \mathbf{c}^e \cdot (\eta - \theta_e), \\
 & \quad \quad \quad \forall \eta \in \mathfrak{R}^{l_{he}}, \\
 & \theta_e(0) = \theta_{0e}, \\
 & \text{y } \{ \mathbf{v}_e \} : (0, T) \rightarrow Q_{N\theta}^* \text{ satisfaciendo la condición} \\
 & \text{de sincronización} \\
 & 0 \geq \sum_{e=1}^E \mathbf{S}^e \theta_e \cdot (\delta - \mathbf{v}_e), \quad \forall \{ \delta \} \in Q_{N\theta}^*.
 \end{aligned} \right\} MHP_h(\{\alpha_e; \theta_e, \mathbf{v}_e\})$$

Aquí las matrices, vectores y funcionales están definidos por las ecuaciones (5.4), rescritas de la siguiente forma, para, $i, j = 1, 2, \dots, n_{h_e}$, $k = 1, 2, \dots, m_{h_e}$, $l = 1, 2, \dots, k_{h_e}$,

$$\left. \begin{aligned}
 K_{i,j}^e(\boldsymbol{\theta}_e) &= \int_{\Omega_e} \mu_e(c_{h_e}) \mathbf{K}_e^{-1} \boldsymbol{\phi}_{e,j} \cdot \boldsymbol{\phi}_{e,i} d\Omega, \\
 \Psi_{u,e}(\boldsymbol{\beta}) &= \int_{\partial\Omega_e \setminus \Gamma_e} \psi_{u,e} \left(\sum_{j=1}^{n_{h_e}} \beta_j \boldsymbol{\phi}_{e,j} \cdot \mathbf{n}_e \right) d\partial\Omega, \\
 L_{k,j}^e &= - \int_{\Omega_e} \psi_{e,k} \operatorname{div} \boldsymbol{\phi}_{e,j} d\Omega, \\
 T_{l,j}^e &= \int_{\Gamma_e} \boldsymbol{\phi}_{e,j} \cdot \mathbf{n}_e d\Gamma_e, \\
 f_j^e(\boldsymbol{\theta}_e) &= \int_{\Omega_e} \rho_e(c_{h_e}) \mathbf{g}_e \cdot \boldsymbol{\phi}_{e,j} d\Omega, \\
 q_k^e &= \int_{\Omega_e} \hat{q}_e \psi_{e,k} d\Omega,
 \end{aligned} \right\} \quad (5.10)$$

y para $m = 1, 2, \dots, l_{h_e}$, $d = 1, 2, \dots, d_{h_e}$,

$$\left. \begin{aligned}
 M_{m,n}^e &= \int_{\Omega_e} \phi_e \chi_{e,n} \chi_{e,m} d\Omega, \\
 D_{m,n}^e(\boldsymbol{\alpha}) &= \int_{\Omega_e} \mathbf{D}_e(\phi_e, u_{h_e}) \operatorname{grad} \chi_{e,n} \cdot \operatorname{grad} \chi_{e,m} d\Omega, \\
 A_{j,n}^e &= \int_{\Omega_e} \phi_{e,j} \cdot \operatorname{grad} \chi_{e,n} d\Omega, \\
 E_{m,n}^e &= \int_{\Omega_e} \hat{q}_e \chi_{e,n} \chi_{e,m} d\Omega, \\
 \Psi_{c,e}(\boldsymbol{\eta}) &= \int_{\partial\Omega_e \setminus \Gamma_e} \psi_{c,e} \left(\sum_{j=1}^{l_{h_e}} \eta_j \chi_{e,j} \right) d\partial\Omega, \\
 S_{d,n}^e &= \int_{\Gamma_e} \zeta_{e,d} \chi_{e,n} d\Gamma, \\
 c_n^e &= \int_{\Omega_e} \hat{c}_e \hat{q}_e \chi_{e,n} d\Omega.
 \end{aligned} \right\} \quad (5.11)$$

Capítulo 6

Algoritmos Iterativos de Punto Prójimo.

En la solución numérica de las desigualdades variacionales mixtas macrohíbridas discretizadas por elemento finito (\mathbf{MHM}_h) - (\mathbf{MHP}_h) , se aplican algoritmos numéricos tipo Uzawa y Dualidad-Penalización, los cuales son generados por caracterización de resolventes y aproximaciones de punto prójimo. La metodología se basa en los algoritmos de Gabay, que consiste en caracterizar ecuaciones subdiferenciales monótonas en términos de resolventes u operadores de proximación [8,9].

Uno de los aspectos importantes de tales algoritmos iterativos es su alto grado de paralelización, que junto con los métodos de descomposición de dominios resultan ser muy efectivos para la solución de sistemas no lineales con restricciones y multiescala.

En el caso de problemas potenciales, estos procesos numéricos corresponden a optimización de formulaciones Lagrangianas y Lagrangianas aumentadas que se derivan sistemáticamente de la teoría de dualidad-perturbación. Para desigualdades variacionales mixtas no estacionarias, estos procesos numéricos son interpretados como esquemas de integración numérica en el tiempo que evolucionan de un estado inicial hacia uno estacionario.

Los algoritmos tipo Uzawa se identifican como esquemas semiimplícitos de Euler, los de Dualidad-Penalización, como implícitos de Euler y los de partición, con operadores de Douglas-Rachford y Peaceman-Rachford.

Para la solución numérica de los problemas (\mathbf{MHM}_h) - (\mathbf{MHP}_h) , se pueden aplicar diferentes algoritmos en paralelo tales como ALG1, ALG2, ALG3 y ALG5, que son de tipo dualidad-penalización, pero en esta investigación únicamente se desarrolla y aplica el ALG5, para más información sobre el desarrollo de los algoritmos restantes consultar los siguientes trabajos [8,9].

Metodología para el problema (MHM_h)

El problema (MHM_h) se expresa en forma subdiferencial, para poder hacer esto, se introducen los siguientes operadores monótonos maximales locales, para $e = 1, 2, \dots, E$,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^e(\beta) &= \mathbf{A}^e \beta + \partial \Psi_e(\beta) - f^e, \quad \beta \in \mathfrak{R}^{n_{he}}, \\ \partial \mathbf{G}^{e*}(\nu) &= \partial (\mathbf{I}_{\{0\}})^*(\nu) - \mathbf{q}^e, \quad \nu \in \mathfrak{R}^{m_{he}}, \end{aligned} \quad (6.1)$$

por lo que el problema se escribe en la forma siguiente:

$$(MHM_h) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\alpha_e, \lambda_e) \in \mathfrak{R}^{n_{he}} \times \mathfrak{R}^{m_{he}}, \text{ para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -\mathbf{L}^{eT} \lambda_e - \mathbf{T}^{eT} \pi_e \in \mathcal{A}^e(\alpha_e), \\ \mathbf{L}^e \alpha_e \in \partial \mathbf{G}^{e*}(\lambda_e); \\ \text{y } \{\pi_e\} \in \mathbf{Q}_{N_h}^* \text{ satisfaciendo la condición de sincronización} \\ \{\mathbf{T}^e \alpha_e\} \in \partial \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{N_h}^*}(\{\pi_e\}). \end{array} \right. \quad (6.2)$$

Para desarrollar el algoritmo, se simplifica la forma del (MHM_h) y se escribe como un mixto general,

$$(M) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\alpha, \lambda^*) \in \mathbf{V} \times \mathbf{Y} : \\ -\Lambda^T \lambda^* \in \mathcal{A}(\alpha), \\ \Lambda \alpha \in \partial \mathbf{G}^*(\lambda^*), \end{array} \right. \quad (6.3)$$

donde los campos discretos primal y dual son:

$$\begin{aligned} \alpha &\simeq \{\alpha_e\} \in \mathbf{V} = \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{n_{he}} \\ \lambda^* &\simeq (\{\lambda_e\}, \{\pi_e\}) \in \mathbf{Y} = \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}} \times \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{k_{he}}. \end{aligned}$$

y los operadores monótonos maximales abstractos $\mathcal{A} : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{2}^{\mathbf{V}}$, $\Lambda \in \mathcal{L}(\mathbf{V}, \mathbf{Y})$, lineales, continuos y transpuesto $\Lambda^T \in \mathcal{L}(\mathbf{Y}, \mathbf{V})$, $\partial \mathbf{G}^* : \mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{2}^{\mathbf{Y}}$ monótono que corresponden a:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}(\alpha) &\simeq \{\mathcal{A}^e(\alpha_e)\}, \\
\Lambda\alpha &\simeq (\{\mathbf{L}^e\alpha_e\}, \{\mathbf{T}^e\alpha_e\}), \\
\Lambda^T\lambda^* &\simeq \{\mathbf{L}^{eT}\lambda_e + \mathbf{T}^{eT}\pi_e\}, \\
\partial\mathbf{G}^*(\lambda^*) &\simeq (\{\partial\mathbf{G}^{e*}(\lambda_e)\}, \partial\mathbf{I}_{Q_{N\alpha}^*}(\{\pi_e\})).
\end{aligned} \tag{6.4}$$

Algoritmo ALG5

Siendo un algoritmo de tipo dualidad penalización, se procede a aumentar la ecuación dual del (M), para ello se multiplica por un parámetro $r > 0$ ambos miembros de la ecuación y se le suma λ^* , entonces se expresa de la manera siguiente:

$$\lambda^* + r\Lambda\alpha \in (\mathbf{I} + r\partial\mathbf{G}^*)(\lambda^*). \tag{6.5}$$

Siendo operadores monótonos maximales, lineales y continuos, el operador de resolvente se define por

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

el cual es una contracción firme y se caracteriza por un operador de proximidad

$$\mathbf{J}_{\partial\mathbf{G}^*}^r \equiv (\mathbf{I} + r\partial\mathbf{G}^*)^{-1} = \mathbf{Prox}_{r\mathbf{G}^*} = \mathbf{I} - \mathbf{Prox}_{r\mathbf{G} \circ (1/r)\mathbf{I}}, \tag{6.6}$$

el cual está relacionado con el subpotencial primal $r\mathbf{G} \circ (1/r)\mathbf{I} : \mathbf{Y} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$, mediante la siguiente expresión:

$$\mathbf{Prox}_{r\mathbf{G} \circ (1/r)\mathbf{I}}(\mathbf{v}^*) = \arg \left(\inf_{\delta^* \in \mathbf{D}(r\mathbf{G} \circ (1/r)\mathbf{I})} \left\{ \frac{1}{2} \|\delta^* - \mathbf{v}^*\|^2 + r\mathbf{G}((1/r)\delta^*) \right\}, \right) \tag{6.7}$$

al sustituir (6.6) en (M) se genera el siguiente proceso iterativo.

$$(\text{ALG5}) \left\{ \begin{array}{l}
\text{Dado } \lambda_0^* \in \mathcal{D}(G^*), \text{ conocer } \lambda_m^*, m \geq 0, \\
\text{calcular } \alpha^{m+1} \text{ y } \lambda_{m+1}^* : \\
-\Lambda^T (\mathbf{I} - \mathbf{Prox}_{r\mathbf{G} \circ (1/r)\mathbf{I}}) (\lambda_m^* + r\Lambda\alpha^{m+1}) \in \mathcal{A}(\alpha^{m+1}), \\
\lambda_{m+1}^* = (\mathbf{I} - \mathbf{Prox}_{r\mathbf{G} \circ (1/r)\mathbf{I}}) (\lambda_m^* + r\Lambda\alpha^{m+1}).
\end{array} \right. \tag{6.8}$$

El funcional indicatriz, que es el subpotencial primal del subdiferencial (6.4), es definido por,

$$G(\boldsymbol{\nu}, \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{I}_{\{-q^e\}}(\boldsymbol{\nu}) + \mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{D_\alpha}}(\boldsymbol{\mu}), (\boldsymbol{\nu}, \boldsymbol{\mu}) \in \mathbf{Y}, \quad (6.9)$$

donde \mathbf{Q}_{D_α} es el subespacio conjugado de $\mathbf{Q}_{N_\alpha}^*$ definido en (5.5),

$$\mathbf{Q}_{D_\alpha} = \left\{ \{\boldsymbol{\mu}_e\} \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{k_{he}} : \sum_{l=1}^{k_{he}} \mu_{e,l} \xi_{e,l} = - \sum_{l=1}^{k_{hf}} \mu_{f,l} \xi_{f,l} \text{ en } \Gamma_{ef}, 1 \leq e < f \leq E \right\} \quad (6.10)$$

por lo que el operador de proximidad (6.7), es interpretado como una proyección:

$$\begin{aligned} \mathbf{Prox}_{rG \circ (1/r)\mathbf{I}}(\boldsymbol{\nu}, \boldsymbol{\mu}) &= \left(\mathbf{Proj}_{-r\{q^e\}}(\boldsymbol{\nu}), \mathbf{Proj}_{\mathbf{Q}_{D_\alpha}}(\boldsymbol{\mu}) \right), \\ &= \left(-r\{q^e\}, \mathbf{Proj}_{\mathbf{Q}_{D_\alpha}}(\boldsymbol{\mu}) \right), (\boldsymbol{\nu}, \boldsymbol{\mu}) \in \mathbf{Y}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Consecuentemente, tomando en cuenta (6.1) y las relaciones (6.4), el algoritmo **ALG5**, para el problema macro-híbrido mixto toma la forma siguiente,

$$\widetilde{\text{ALG5}}_{\text{MHM}} \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \{\boldsymbol{\alpha}_e^0\} \in \prod_{e=1}^E \mathcal{D}(\Psi_e), (\{\boldsymbol{\lambda}_e^0\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^0\}), \\ \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}} \times \mathbf{Q}_{N_\alpha}^*, \text{ conocer } \{\boldsymbol{\alpha}_e^m\}, (\{\boldsymbol{\lambda}_e^m\}, \{\boldsymbol{\pi}_e^m\}), m \geq 0 \\ \text{calcule } \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}, \text{ y } \boldsymbol{\lambda}_e^{m+1}, \text{ para } e = 1, 2, \dots, E : \\ - \left(\mathbf{L}^{eT} \boldsymbol{\lambda}_e^m + \mathbf{T}^{eT} \boldsymbol{\pi}_e^m + r \mathbf{L}^{eT} \mathbf{q}^e \right) + \mathbf{T}^{eT} \mathbf{Proj}_{\mathbf{Q}_{D_\alpha}} \left(\{\boldsymbol{\pi}_f^m + r \mathbf{T}^f \boldsymbol{\alpha}_f^m\} \right)_e \\ \in \left(\mathbf{A}^e + r \mathbf{L}^{eT} \mathbf{L}^e + r \mathbf{T}^{eT} \mathbf{T}^e \right) \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} + \partial \Psi_e(\boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}) - f^e, \\ \boldsymbol{\lambda}_e^{m+1} = \boldsymbol{\lambda}_e^m + r \mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1} + r \mathbf{q}^e; \\ \text{y } \{\boldsymbol{\pi}_e^{m+1}\} \text{ de acuerdo con la sincronización} \\ \{\boldsymbol{\pi}_e^{m+1}\} = \{\boldsymbol{\pi}_e^m + r \mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\} - \mathbf{Proj}_{\mathbf{Q}_{D_\alpha}} \left(\{\boldsymbol{\pi}_e^m + r \mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e^{m+1}\} \right). \end{array} \right.$$

Metodología para el Problema (MHM_h)-(MHP_h)

El modelo macrohíbrido velocidad-presión-concentración se expresa en forma subdiferencial.

$$\text{MHM}_h(\{\boldsymbol{\theta}_e; \boldsymbol{\alpha}_e, \boldsymbol{\lambda}_e, \boldsymbol{\pi}_e\}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\boldsymbol{\alpha}_e, \boldsymbol{\lambda}_e) : (0, T) \rightarrow \mathfrak{R}^{n_{he}} \times \mathfrak{R}^{m_{he}}, \\ \text{para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -\mathbf{L}^{eT} \boldsymbol{\lambda}_e - \mathbf{T}^{eT} \boldsymbol{\pi}_e \in A^e(\boldsymbol{\theta}_e; \boldsymbol{\alpha}_e), \\ \mathbf{L}^e \boldsymbol{\alpha}_e \in \partial \mathbf{G}^{e*}(\boldsymbol{\lambda}_e) \\ \text{y } \{\boldsymbol{\pi}_e\} : (0, T) \rightarrow Q_{N\alpha}^* \text{ satisfaciendo la condición} \\ \text{de sincronización} \\ \{\mathbf{T}^e \boldsymbol{\alpha}_e\} \in \partial \mathbf{I}_{Q_{N\alpha}^*}(\{\boldsymbol{\pi}_e\}); \end{array} \right.$$

$$\text{MHP}_h(\{\boldsymbol{\alpha}_e; \boldsymbol{\theta}_e, \boldsymbol{\nu}_e\}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } \boldsymbol{\theta}_e : (0, T) \rightarrow \mathfrak{R}^{l_{he}}, \\ \text{para } e = 1, 2, \dots, E : \\ -\mathbf{S}^{eT} \boldsymbol{\nu}_e \in \mathbf{M}^e \frac{d\boldsymbol{\theta}_e}{dt} + B^e(\boldsymbol{\alpha}_e; \boldsymbol{\theta}_e) \\ \boldsymbol{\theta}_e(0) = \boldsymbol{\theta}_{0e}, \text{ y } \{\boldsymbol{\nu}_e\} : (0, T) \rightarrow Q_{N\theta}^* \text{ satisfaciendo la condición} \\ \text{de sincronización} \\ \{\mathbf{S}^e \boldsymbol{\theta}_e\} \in \partial \mathbf{I}_{Q_{N\theta}^*}(\{\boldsymbol{\nu}_e\}). \end{array} \right.$$

Los operadores monótonos máximos: $A^e : \mathfrak{R}^{n_{he}} \rightarrow 2^{\mathfrak{R}^{n_{he}}}$, $\partial \mathbf{G}^{e*} : \mathfrak{R}^{m_{he}} \rightarrow 2^{\mathfrak{R}^{m_{he}}}$ y $B^e : \mathfrak{R}^{l_{he}} \rightarrow 2^{\mathfrak{R}^{l_{he}}}$ son definidos por:

$$A^e(\boldsymbol{\theta}_e; \boldsymbol{\beta}) = \mathbf{K}^e(\boldsymbol{\theta}_e) \boldsymbol{\beta} + \partial \Psi_{u,e}(\boldsymbol{\beta}) - f^e(\boldsymbol{\theta}_e), \quad \boldsymbol{\beta} \in \mathfrak{R}^{n_{he}}, \quad (6.12)$$

$$\partial \mathbf{G}^{e*}(\boldsymbol{\nu}) = \partial (\mathbf{I}_{\{0\}})^*(\boldsymbol{\nu}) - \mathbf{q}^e, \quad \boldsymbol{\nu} \in \mathfrak{R}^{m_{he}}, \quad (6.13)$$

$$B^e(\boldsymbol{\alpha}_e; \boldsymbol{\eta}) = \{\mathbf{D}^e(\boldsymbol{\alpha}_e) + \mathbf{A}^e + \mathbf{E}^e\} \boldsymbol{\eta} + \partial \Psi_{c,e}(\boldsymbol{\eta}) - \mathbf{c}^e, \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathfrak{R}^{l_{he}}, \quad (6.14)$$

Ahora se escriben los sistemas $(MHM_h) - (MHP_h)$ en forma mixta general.

Problema Mixto Macrohíbrido Discreto

$$MHM_h(\{\theta_e^n; \alpha_e^n, \lambda_e^n, \pi_e^n\}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\{\alpha_e^n\}, \{\lambda_e^n\}, \{\pi_e^n\}) \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{n_{he}} \times \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}} \times Q_{N_\alpha}^* \\ - \{L^{eT} \lambda_e^n + T^{eT} \pi_e^n\} \in \{A_n^e(\theta_e^n; \alpha_e^n)\}, \\ (\{L^e \alpha_e^n\}, \{T^e \alpha_e^n\}) \in (\{\partial G_n^{e*}(\lambda_e^n)\}, \partial I_{Q_{N_\alpha}^*}(\{\pi_e^n\})); \end{array} \right.$$

Esquema Implícito de Euler

$$\widetilde{MHP}_h(\{\alpha_e^n; \theta_e^{n+1}, \nu_e^{n+1}\}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\{\theta_e^{n+1}\}, \{\nu_e^{n+1}\}) \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{l_{he}} \times Q_{N\theta}^* : \\ - \{S^{eT} \nu_e^{n+1}\} \in \left\{ M^e \frac{\theta_e^{n+1} - \theta_e^n}{t_{n+1} - t_n} \right\} + \{B_n^e(\alpha_e^n; \theta_e^{n+1})\} \\ \{S^e \theta_e^{n+1}\} \in \partial I_{Q_{N\theta}^*}(\{\nu_e^{n+1}\}). \end{array} \right.$$

El problema primal (\widetilde{MHP}_h) se integra numéricamente en el tiempo con un implícito de Euler. Para llevar a cabo el desarrollo de los algoritmos, se busca identificar cada uno de los sistemas $(MHM_h) - (\widetilde{MHP}_h)$ con el problema (M) .

$$(M) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encuentre } (\alpha, \lambda^*) \in \mathbf{V} \times \mathbf{Y} : \\ - \Lambda^T \lambda^* \in \mathcal{A}(\alpha), \\ \Lambda \alpha \in \partial G^*(\lambda^*). \end{array} \right. \quad (6.15)$$

Los espacios \mathbf{V} y \mathbf{Y} son de dimensión finita con producto interno, $\mathcal{A} : \mathbf{V} \rightarrow 2^{\mathbf{Y}}$ es un operador monótono maximal, $\Lambda \in \mathcal{L}(\mathbf{V}, \mathbf{Y})$ es un operador lineal y continuo con transpuesto $\Lambda^T \in \mathcal{L}(\mathbf{Y}, \mathbf{V})$, y $\partial G^* : \mathbf{Y} \rightarrow 2^{\mathbf{Y}}$ es un subdiferencial monótono del funcional conjugado $G^* : \mathbf{Y} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$.

Siguiendo la estrategia del (MHM_h) que se desarrolló en párrafos anteriores, se tiene el siguiente proceso iterativo ALG5 para el $MHM_h(\{\theta_e; \alpha_e, \lambda_e, \pi_e\})$.

$$(\text{ALG5}_{\text{MHM}}) \left\{ \begin{array}{l}
\text{Dado } (\{\lambda_e^0\}, \{\pi_e^0\}) \in \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{m_{he}} \times Q_{N\alpha}^*, \text{ conocido } (\{\lambda_e^m\}, \{\pi_e^m\}), \\
m \geq 0, \text{ calcule } \{\alpha_e^m\} \text{ y } (\{\lambda_e^{m+1}\}, \{\pi_e^{m+1}\}): \\
-\{\mathbf{L}^{eT} \lambda_e^m + \mathbf{T}^{eT} \pi_e^m - r \mathbf{L}^{eT} \mathbf{q}_e^m\} + \mathbf{T}^T \text{Proj}_{Q_{D\alpha}} (\{\pi_e^m + r \mathbf{T}^e \alpha_e^m\}) \\
\in \left\{ (\mathbf{K}^e(\theta_e) + r \mathbf{L}^{eT} \mathbf{L}^e + r \mathbf{T}^{eT} \mathbf{T}^e) \alpha_e^m + \partial \Psi_{u,e}(\alpha_e^m) - f^e(\theta_e) \right\}, \\
\lambda_e^{m+1} = \lambda_e^m + r \mathbf{L}^e \alpha_e^m + r \mathbf{q}_e^m, \text{ para } e = 1, 2, \dots, E, \\
\{\pi_e^{m+1}\} = \{\pi_e^m + r \mathbf{T}^e \alpha_e^m\} - \text{Proj}_{Q_{D\alpha}} (\{\pi_e^m + r \mathbf{T}^e \alpha_e^m\}).
\end{array} \right.$$

Como se mencionó anteriormente, en la solución del problema $(\widetilde{\text{MHP}}_h)$ se aplica un esquema implícito de Euler. En este caso, se tiene que las variables dependientes primal y dual de los vectores de elemento finito de concentración local y flujo de masa en la frontera interna, son definidos como:

$$\left. \begin{array}{l}
\boldsymbol{\alpha} \simeq \{\boldsymbol{\theta}_e\} \in \mathbf{V} = \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{l_{he}}, \\
\boldsymbol{\lambda}^* \simeq \{\boldsymbol{\nu}_e\} \in \mathbf{Y} = \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{d_{he}},
\end{array} \right\} \quad (6.16)$$

y los operadores por

$$\left. \begin{array}{l}
\boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}^* \simeq \{\mathbf{S}^{eT} \boldsymbol{\nu}_e\}, \\
\mathcal{A}(\boldsymbol{\alpha}) \simeq \{\tilde{\mathcal{B}}^e(\boldsymbol{\alpha}_e, \boldsymbol{\theta}_e)\}, \\
\boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha} \simeq \{\mathbf{S}^e \boldsymbol{\theta}_e\}, \\
\partial \mathbf{G}^*(\boldsymbol{\lambda}^*) \simeq \partial \mathbf{I}_{Q_{N\theta}^*}(\{\boldsymbol{\nu}_e\}).
\end{array} \right\} \quad (6.17)$$

Aquí, el operador primal local es modificado y definido por

$$\tilde{\mathcal{B}}^e(\boldsymbol{\alpha}_e; \boldsymbol{\eta}) = \left\{ \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}^e + \mathbf{D}^e(\boldsymbol{\alpha}_e^n) + \mathbf{A}^e + \mathbf{E}^e \right\} \boldsymbol{\eta} + \partial \Psi_{c,e}(\boldsymbol{\eta}) - \tilde{c}^e, \boldsymbol{\eta} \in \mathfrak{R}^{l_{he}}. \quad (6.18)$$

para $e = 1, 2, \dots, E$, con un término constante

$$\tilde{c}^e = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}^e \boldsymbol{\theta}_e^n + \mathbf{c}_n^e \quad (6.19)$$

y también $\Delta t = t_{n+1} - t_n$, denota un paso en el tiempo. El subpotencial primal $G : \prod_{e=1}^E \mathfrak{R}^{d_{he}} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ es definido por el funcional indicador,

$$G(\boldsymbol{\mu}) = I_{Q_{D\theta}}(\boldsymbol{\mu}) \quad (6.20)$$

del subespacio $Q_{D\theta}$, el conjugado del subespacio de admiscibilidad de transmisión $Q_{N\theta}^*$, entonces el operador de proximidad del **ALG5** es equivalente con la proyección

$$\mathbf{Prox}_{rG \circ (1/r)I}(\boldsymbol{\mu}) = \mathbf{Proj}_{Q_{D\alpha}}(\boldsymbol{\mu}) \quad (6.21)$$

por lo que el algoritmo se expresa en forma explícita por las siguientes ecuaciones.

$$\left(\mathbf{ALG5}_{\widetilde{\text{MHP}}} \right) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } \{\boldsymbol{\nu}_e^0\} \in Q_{N\theta}^*, \text{ conocido } \{\boldsymbol{\nu}_e^m\}, m \geq 0, \text{ calcule } \{\boldsymbol{\theta}_e^m\} \text{ y } \{\boldsymbol{\nu}_e^{m+1}\}: \\ - \{S^e T \boldsymbol{\nu}_e^m\} + S^T \mathbf{Proj}_{Q_{D\theta}}(\{\boldsymbol{\nu}_e^m + r \mathbf{S}^e \boldsymbol{\theta}_e^m\}) \\ \in \left\{ \left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}^e + \mathbf{D}^e(\boldsymbol{\alpha}_e) + \mathbf{A}^e + \mathbf{E}^e + r \mathbf{S}^{eT} \mathbf{S}^e \right) \boldsymbol{\theta}_e^m + \partial \Psi_{c,e}(\boldsymbol{\theta}_e^m) - \tilde{c}^e \right\}, \\ \{\boldsymbol{\nu}_e^{m+1}\} = \{\boldsymbol{\nu}_e^m + r \mathbf{S}^e \boldsymbol{\theta}_e^m\} - \mathbf{Proj}_{Q_{D\theta}}(\{\boldsymbol{\nu}_e^m + r \mathbf{S}^e \boldsymbol{\theta}_e^m\}). \end{array} \right.$$

Capítulo 7

Experimentación Numérica

En este capítulo se presentan los experimentos numéricos que ejemplifican la teoría y metodología de los algoritmos tipo dualidad penalización sobre el dominio espacial bidimensional $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, con aproximación de elemento finito mixto de Raviart-Thomas de orden cero en mallas conformes y no conformes.

Para su realización se hizo uso del programa computacional desarrollado en el Departamento de Recursos Naturales del Instituto de Geofísica por Norberto Vera Guzmán y Gonzalo Alduncin, el cual simula flujo monofásico y desplazamiento miscible en un medio poroso. Este programa está estructurado por módulos en Fortran 77 y junto con la biblioteca de computo científico Modulef están instalados en una estación de trabajo UltraSparc 5, trabajando con plataforma Unix y sistema operativo Solaris. En esta tesis se procedió de la siguiente manera:

1. Modificación del programa y compilación en Fortran 77.
2. Selección de las propiedades del medio.
3. Imposición de condiciones de frontera tipo presión y concentración.

La forma y tiempo para resolver las ecuaciones depende de la asignación de criterios que se especifiquen, tales como condiciones de frontera, mallas y los parámetros físicos. Los resultados se presentan de una forma gráfica mediante colores que indican la presión, iso líneas para concentración y las flechas la dirección y magnitud de flujo.

En la realización de los experimentos numéricos del modelo de flujo monofásico se consideraron las siguientes propiedades físicas del medio y el parámetro r del algoritmo **ALG5**, el cual se obtuvo de forma experimental y es el óptimo para que converja más rápido hacia la solución.

Propiedades de flujo monofásico:

- a) Viscosidad = 0.001 $(Pa \cdot s)$
- b) Densidad = 1000 (Kg/m^3)
- c) Gravedad = -9.81 (m/s^2)
- d) Parámetro $r = 1 \times 10^{10}$
- e) La permeabilidad $\begin{cases} Kx = 1 \times 10^{-12} & (m^2) \\ Ky = 1 \times 10^{-12} & (m^2) \end{cases}$

Para una mejor descripción de las propiedades del medio y de las condiciones y restricciones que se establecen en la simulación, el sistema geohidrológico donde se simula flujo monofásico, se divide en nueve subdominios. El número uno empieza en la parte izquierda inferior y el dos y tres hacia la derecha, el cuatro está arriba del primero, siguiendo el mismo orden, el siete arriba del cuatro y el nueve en la parte superior derecha.

La figura 8.1, muestra una sección vertical con permeabilidad homogénea, presión prescrita en los lados de los subdominios uno, tres, cuatro, seis y ocho. En los subsistemas siete y nueve la presión es igual a cero. La parte inferior de los subdominios, uno, dos y tres es impermeable. El flujo está saliendo por los lados donde la presión es cero, como se puede observar en la gráfica. El mallado es diferente en cada subdominio.

En la figura 8.2, se muestra también una sección vertical, con los lados de los subdominios, uno, cuatro, siete en la parte izquierda y en la derecha el tres, seis y nueve con presión igual a cero. En la parte superior del ocho se prescribe presión, mientras que toda la parte inferior es impermeable. El flujo sale por los lados donde la presión es igual a cero y se puede observar simetría.

Ahora en la figura 8.3, la permeabilidad varía en cada subsistema, es decir, es un caso no homogéneo. La presión se prescribe en la parte izquierda de los subdominios uno, cuatro y siete. En los subdominios cinco y seis la permeabilidad es mucho mayor que en los demás, dando como resultado un cambio brusco en la dirección de flujo hacia los subsistemas del centro. El mallado es no conforme. Bajo estas condiciones el comportamiento del flujo es simétrico.

En la figura 8.4 también se presenta un caso no homogéneo con permeabilidad anisótropa. Se prescribe presión en el subdominio ocho. El lado derecho del subsistema siete es impermeable y la presión es cero en la parte izquierda. El subsistema cinco tiene una permeabilidad muy baja, por lo que el flujo en esa región es muy pequeño y se puede observar que el flujo sale por donde la permeabilidad es mayor. Los lados restantes son impermeables y el mallado es no conforme.

La figura 8.5 es un sistema no homogéneo, con presión prescrita en la parte izquierda de los subdominios uno, cuatro y siete. Presión cero en los lados derechos de los subdominios tres, seis y nueve. La permeabilidad en los subdominios cinco y seis es mayor, por lo que se observa una variación fuerte del flujo por en medio hacia la derecha. La escala espacial varía en los subsistemas cuatro, cinco y seis. El mallado es diferente en cada región localizada, es decir, de 10×10 , 5×5 , 2×2 elementos finitos.

La figura 8.6, presenta un caso heterogéneo con anisotropía. La variación se hace en la dirección y , manteniendo x constante. Se puso una fuente en la parte inferior izquierda del subdominio uno y un sumidero en la parte superior derecha del nueve. El flujo es mayor en la dirección x , y en y es mucho menor, por eso el comportamiento es totalmente asimétrico. El mallado de elemento finito es conforme y es de 10×10 en todos los subsistemas.

En la figura 8.7 se muestra el caso anterior, pero totalmente homogéneo con permeabilidad isotropa. Como se puede observar el flujo tiene un comportamiento simétrico desde la fuente hasta el sumidero. El mallado de elemento finito es conforme en todos los subdominios y es de 10×10 .

En la figura 8.8 se presenta un sistema heterogéneo con anisotropía. La dirección y se modifica, la cual toma valores muy pequeños a los ya establecidos en los datos iniciales de la permeabilidad, la componente x mantiene su valor constante. Se prescribe presión en la parte inferior del subdominio uno y presión cero en la parte superior derecha del nueve. El flujo es totalmente asimétrico, siendo mayor en la dirección x . Los lados de los subdominios restantes son impermeables. Las mallas de elemento finito son conformes de 10×10 .

Por último las figuras 8.9 y 8.10 muestran sistemas homogéneos e isotropos, con presión prescrita en el subdominio ocho y presión igual acero en los subsistemas uno, cuatro, siete, tres, seis y nueve. Los demás lados son impermeables. La escala espacial de los subdominios siete, ocho y nueve del primer sistema varia en relación con los demás. En el segundo dominio, las partes dos, cinco, siete, ocho y nueve son menores en escala espacial, comparadas con los subdominios restantes. En ambos sistemas el comportamiento del flujo es simétrico. Las mallas son conformes en los dos sistemas.

La simulación de desplazamiento miscible se hizo bajo las siguientes condiciones y restricciones:

Los parámetros físicos del medio fueron elegidos para representar un acuífero homogéneo o heterogéneo, con una porosidad de 0.25, una dispersividad longitudinal y transversal de 0.5 m , el coeficiente de difusión molecular se mantiene constante a $5 \times 10^{-5} m^2/dia$. La densidad $\rho_2 = 1025$. Concentración $QG = 1$, el paso de tiempo $\Delta t = 3600 s$, el parámetro r , para estos experimentos fue igual 0.02.

Similarmente que en la simulación computacional de flujo monofásico donde se dividió el sistema en nueve subregiones, para flujo miscible el dominio rectangular ($1.5m$ de largo por $1m$ de ancho), se divide en diez subsistemas. El primer subdominio empieza en la parte inferior izquierda. El dos, tres, cuatro y cinco van en la dirección horizontal. El subdominio seis en la parte superior del uno. Los subdominios siete, ocho, nueve y diez en el mismo orden de izquierda hacia la derecha.

Para la simulación computacional de flujo miscible, se analizaron tres casos particulares:

La simulación del primer caso presenta una sección vertical no homogénea, con condiciones de frontera de presión y concentración en la parte izquierda de los subdominios uno y seis. La permeabilidad de los subsistemas seis, siete, ocho, nueve y diez es cuatro veces la de los subdominios inferiores. Se observa un mayor avance de la mezcla en la parte superior y en los de abajo, un recorrido más lento, esto debido a la disminución de la permeabilidad en un orden de dos magnitudes a las ya establecidas en los datos iniciales en los subdominios uno, dos, tres, cuatro y cinco. El recorrido del flujo miscible se hace en un tiempo de veinte horas de la parte izquierda hasta la derecha en los subdominios de arriba, mientras que el avance en la parte inferior llega solo hasta inicios del subdominio cuatro. Las mallas de elemento finito son conformes.

Las figuras del caso dos presentan un sistema no homogéneo, donde también se prescribe presión y concentración en la parte izquierda de los subdominios uno y seis. La permeabilidad se incrementa 6 veces en los subdominios superiores y se disminuye en 3, la de los de abajo. El avance de la mezcla ahora es mucho más rápido en los subsistemas superiores, tardándose un tiempo de nueve horas en llegar de la parte izquierda hasta la parte derecha, mientras que en la parte inferior apenas si llegó al subdominio tres. El mallado de elemento finito es conforme.

En las figuras del tercer caso las propiedades físicas son las mismas del caso dos, pero con un mallado diferente en cada subdominio. Los dos primeros subsistemas superior e inferior presentan un mallado conforme de 9×9 elementos finitos, los siguientes son de 7×7 , 5×5 , 4×4 y de 2×2 . Los espacios de aproximación en cada región localizada son de distinta dimensión, esto se refleja como un avance irregular aparente de la concentración hacia la parte derecha.

Capítulo 8

Conclusiones

Para problemas que presentan multifísica y multiescala, un enfoque puramente variacional es apropiado; por eso, en este trabajo, se utilizó la metodología de formulaciones variacionales mixtas macrohíbridas para la solución de los modelos de flujo monofásico y desplazamiento miscible en un medio poroso.

La ventaja de aplicar la formulación macrohíbrida, es que nos permite descomponer el sistema en varios subsistemas, lo que da lugar a tratar las propiedades del medio de una manera independiente en cada subdominio para su simulación computacional. Además, la formulación matemática, aquí utilizada, nos permite imponer condiciones modelables de una manera muy natural en términos de ecuaciones subdiferenciales. Por otro, lado el método de elemento finito permite modelar geometrías muy complejas, condiciones de frontera generales no homogéneas y anisotrópicas, no linealidades; así como ordenes de aproximación variables.

Los algoritmos tipo dualidad-penalización, que se aplicaron para la solución numérica de las desigualdades variacionales originadas por la metodología de subdiferenciales, son muy apropiados para sistemas descompuestos en subdominios sin traslape con sus condiciones y restricciones en forma subdiferencial.

Dentro de esta investigación se desarrolló un modelo sintético de un acuífero ideal, con fines de demostrar los métodos y técnicas propuestos y desarrollados en los capítulos 3,4,5 y 6. Los procedimientos resultan ser efectivos tanto para las formulaciones variacionales, como para el desarrollo de esquemas de elemento finito, así como también para la obtención de algoritmos iterativos, que son directamente concluidos de caracterizaciones de punto fijo mediante operadores de resolventes o de proyección.

El problema de flujo monofásico se resuelve bajo la hipótesis de incompresibilidad, con una aproximación de elemento finito mixto de velocidad presión de Raviart-Thomas de orden cero.

En los diez primeros experimentos numéricos ejemplificamos la teoría matemática, aquí desarrollada. Las condiciones, restricciones y las propiedades del medio

se manejaron de forma muy natural; esto, por supuesto, debido a la formulación subdiferencial. En los ejemplos se presentan casos donde se hacen evidentes las propiedades del medio, tales como: no homogeneidades, anisotropía y la escala espacial. El avance del flujo depende de las características del fluido y de las propiedades del medio, así como de las fuerzas de presión.

En la segunda parte de la experimentación numérica presentamos tres casos particulares para el flujo miscible. La teoría nos proporciona herramientas para tratar las condiciones y restricciones de este tipo de fenómenos de manera muy sencilla. El avance de la mezcla del fluido miscible depende de las propiedades del medio; así como también, de las características del fluido y de las fuerzas de presión.

Futuras líneas de trabajo

Desarrollar un modelo numérico tridimensional, donde se pueda simular flujo multifásico. En este modelo se buscará poder incorporar geometrías irregulares. Es importante resaltar que la realización de un modelo, como el que se pretende realizar, precisa de todo un grupo de trabajo.

Las aplicaciones futuras de esta metodología dependerán, en gran parte, de los presupuestos destinados por nuestra sociedad y profesionales, debidamente calificados, para el desarrollo de este tipo de trabajo.

Bibliografía

- [1] Alduncin, G (2003): Parallel Proximal-Point Algorithms for Constrained Problems in Mechanics: In Practical Applications of Parallel Computing, L.T. Yang and M. Paprzyck; eds., Nova Science, New York. pp. 69-88.

- [2] Alduncin, G., Vera-Guzmán, N (2004): Parallel Proximal-Point Algorithms for Mixed Finite Element Models of Flow in the Subsurface, Communications Numerical Methods in Engineering, Vol. 20. pp. 83-104

- [3] Alduncin, G., Vera-Guzmán, N. (2003) Parallel Algorithm for Compressible Flow in the Subsurface, in EPMESC IX-Computational Methods in Engineering and Science, V.P. Iu (Ed), Swets & Zeitlinger/ A.A. Balkema, Lisse.

- [4] Alduncin, G.; Vera-Guzmán, N.; Hayashi, A. (2002): Mesoscopic and Macroscopic Finite Element Models of Two-Phase Flow in Porous Media with "Big Fractures": in Proceedings of the Fifth World Congress on Computational Mechanics, H.A. Mang, F.G. Rammerstorfer and J. Eberhardsteiner (Eds), Vienna. pp. 1-10.

- [5] Alduncin, G.; (2002): Macro-Hybrid Variational Formulations of Constrained Boundary Value Problems.(submitted, December, 2002).

- [6] Alduncin, G., Nicolás, A., Vera-Guzmán, (2001) N., Parallel Algorithms for Miscible Displacement in Porous Media, in Computational Fluid and Solid, Mechanics. K, J. Bathe(Ed), Elsevier Science, Amsterdam, pp. 1038-1040.

- [7] Alduncin, G.; A. Nicolás.; N. Vera Guzmán. (2001): Parallel Proximal-Point Algorithms for Compositional. Multiphase Flow in Porous Media in Proceed-

ings of the 8th International Conference on Enhancement and Promotion of Computational Methods in Engineering and Science, L. Shaopei, M. Renjie, S. Huisheng, S. Goujun and S. Yan (Eds), Shanghai Jia Tong University, Shanghai, pp. 1-16.

- [8] Alduncin, G. (1998): Numerical Resolvent Methods for Macro-Hybrid Mixed Variational Inequalities. *Numer. Funct. Anal. And Optimiz.* Vol. 19(7&8)., pp. 667-696.

- [9] Alduncin, G. (1997): On Gabay's Algorithms for Mixed Variational Inequalities. *Applied Mathematics Optimization.* Vol. 35. pp. 21-44. Springer-Verlag. New York Inc.

- [10] Alduncin, G. (1996)., Numerical Resolvent for Constrained Problems in Mechanics, *Approximation Theory and its Applications*, Vol. 12, No. 4 pp.1-25.

- [11] Alduncin, G. (1993): Primal and Mixed Upwind Finite Element Approximations of Control Advection-Diffusion Problems. *Computational Mechanics*, Springer-Verlag, Vol. 11, pp. 93-106.

- [12] Alduncin, G. (1993): Resolvent Methods for Optimal Control of Advection-Diffusion Problems in Finite Elements in Fluids, K. Morgan, E. Oñate, J. Periaux, J. Peraire and O. C. Zienkiewics (Eds.), *CIMNE/Pineridge Press*, Barcelona, pp 1356-1363.

- [13] Alduncin, G. (1988): Subdifferential and Variational Formulations of Boundary Value Problems. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, Vol. 72, pp. 173-186.

- [14] Bastian, P.; Helmig, R. (1999): Efficient Fully-Coupled Solution Techniques for Two-Phase Flow in Porous Media: Parallel Multigrid Solution and Large Scale Computations. *Advances in Water Resources.* Vol. 23, pp. 199-216. Elsevier.

- [15] Brezzi. F.; Fortin M. Mixed and Hybrid Finite Element Methods. (1991) Springer-Verlag. New York Inc.
- [16] Bear, J., et al. (Eds.) (1999): Seawater Intrusion in Coastal Aquifers, Kluwer, Dordrecht.
- [17] Chavent, G., Jaffre, J., Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation (North-Holland, Amsterdam, 1986).
- [18] Chen, Z.; Ewing, R. (1999): Mathematical Analysis for Reservoir Models. Siam J. Math. Anal. Vol. 30, No. 2, pp. 431-453.
- [19] Chen, Z.; Ewing, R. (1997): Comparison of Various Formulations of Three-Phase Flow in Porous Media. Journal of Computational Physics. Vol. 132, No. CP9656641, pp. 362-373.
- [20] Chen, Z.; Ewing, R. (1997): Fully Discrete Finite Element Analysis of Multiphase Flow in Groundwater Hydrology. Siam J. Math. Anal. Vol. 34, No. 6, pp. 2228-2253.
- [21] Chen, Z. (1995): Numerical Simulation of Multiphase Flow in Groundwater Hydrology. In Finite Element Modeling of Environmental Problems. G.F. Carey, ED., John Wiley, Chichester, 1995.
- [22] Ciarlet, P.G., Lions, J. L. (Eds.), Handbook of Numerical Analysis, Vol. I: Finite Difference Methods (Part 1), Solution of Equations in R^n (Part 1), (North-Holland, Amsterdam, 1990).
- [23] Ekeland, I., Temam, R., Analyse Convexe et Problèmes Variationnels (Dunod, Paris, 1974).
- [24] Ewing, R.; Wheeler, M. (1980): Galerkin Methods for Miscible Displacement Problems in Porous Media. Siam J. Math. Anal. Vol.17, No. 3, pp. 351-365.

- [25] Ewing, R; (Eds.) (1983): *The Mathematics of Reservoir Simulation*, SIAM, Philadelphia.
- [26] Gurtin, M (1981): *An Introduction to Continuum Mechanics*. Academic Press, Inc. San Diego, California 92101.
- [27] Helmig, R. (1997): *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1997.
- [28] J.E. Roberts,; J.M. Thomas. *Mixed and Hybrid Methods*. *Handbook of Numerical Analysis*, Vol. II. pp. 527-543. *Finite Element Methods (Part 1)* . Edited by P.G. Ciarlet and Lions. 1991. Elsevier Science Publishers B.V. (North-Holland).
- [29] Marle, C.M. (1981): *Multiphase Flow in Porous Media*. Institut Francais du Pétrole. École Nationale Supérieure du Pétrole et Des Moteurs.
- [30] Malta, S. M. C.; Loula, A. F. D. (1997): *Numerical Analysis of Finite Element Methods for Miscible Displacements in Porous Media*. Laboratório Nacional de Computação Científica Rua Luuro Müller, 455, Botafogo, Rio de Janeiro, RJ. CEP 22290-160, Brazil.

Lista de Figuras

Simulación de Flujo Monofásico Bidimensional

Primer subdominio.....	42
Segundo subdominio.....	42
Tercer Subdominio.....	43
Cuarto Subdominio.....	43
Quinto Subdominio.....	44
Sexto subdominio.....	44
Séptimo subdominio.....	45
Octavó subdominio.....	45
Noveno subdominio.....	46
Décimo subdominio.....	46

Simulación de Desplazamiento Miscible Caso I

Desplazamiento Miscible 1 y 3 horas.....	47
Desplazamiento Miscible 4 y 6 horas.....	48
Desplazamiento Miscible 7 y 9 horas.....	49
Desplazamiento Miscible 10 y 12 horas.....	50
Desplazamiento Miscible 13 y 15 horas.....	51
Desplazamiento Miscible 16 y 18 horas.....	52
Desplazamiento Miscible 19 y 20 horas.....	53

Simulación de Desplazamiento Miscible Caso II

Desplazamiento Miscible 1 y 3 horas.....	54
Desplazamiento Miscible 4 y 6 horas.....	55
Desplazamiento Miscible 7 y 9 horas.....	56

Simulación de Desplazamiento Miscible con Mallados Diferentes. Caso III

Desplazamiento Miscible 1 y 3 horas.....	57
Desplazamiento Miscible 4 y 6 horas.....	58
Desplazamiento Miscible 7 y 9 horas.....	59

Simulación de Flujo Monofásico

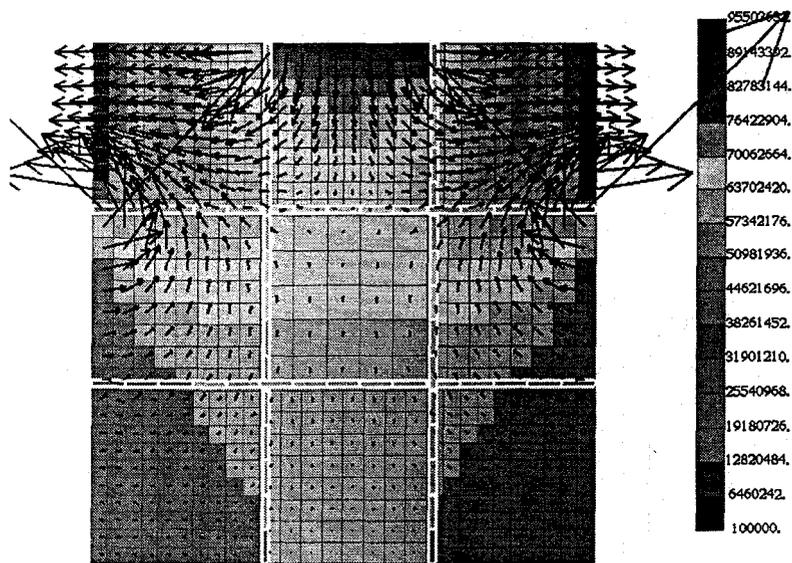


Figura 8.1: Flujo Monofásico.

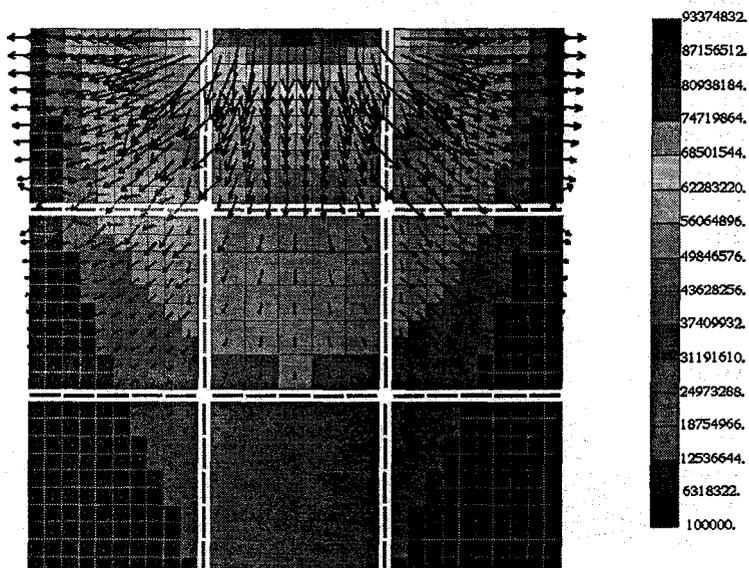


Figura 8.2: Flujo Monofásico.

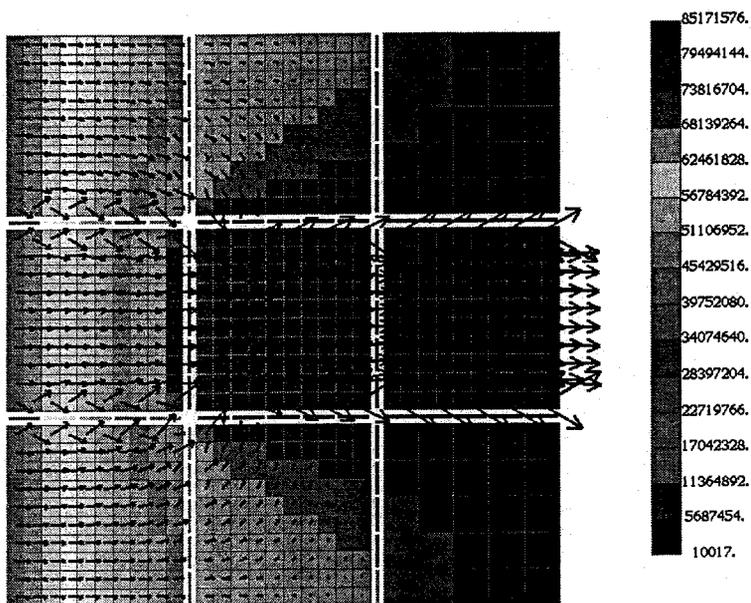


Figura 8.3: Flujo Monofásico.

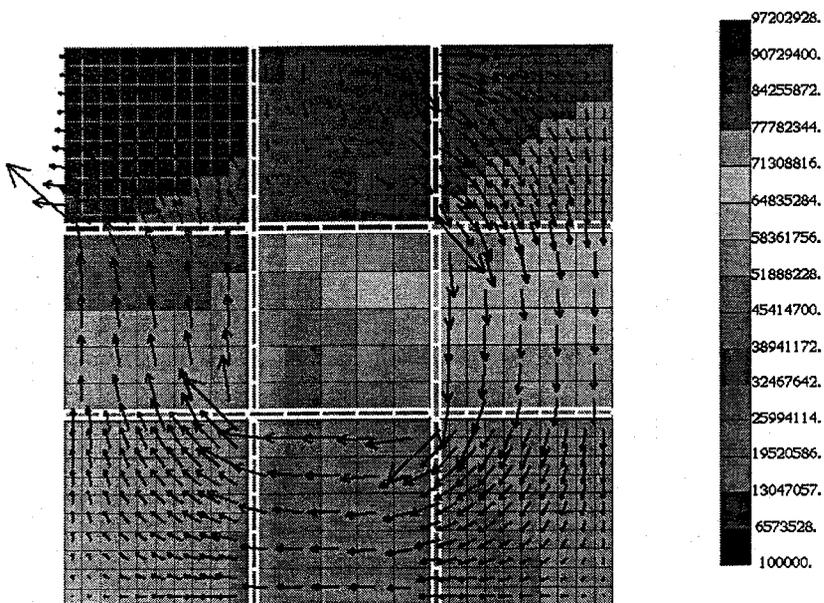


Figura 8.4: Flujo Monofásico.

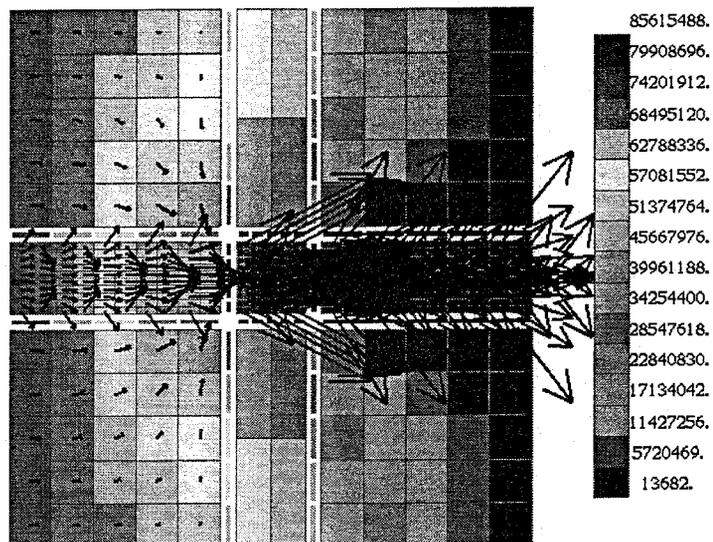


Figura 8.5: Flujo Monofásico.

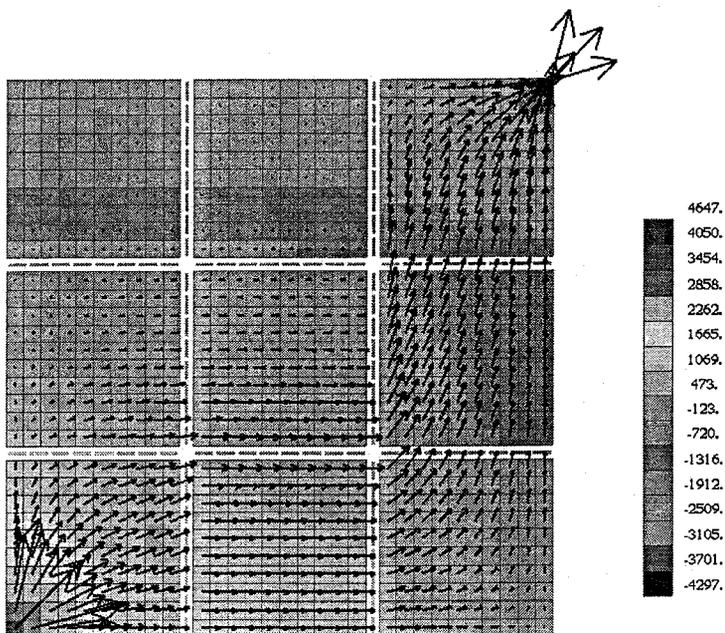


Figura 8.6: . Flujo Monofásico.

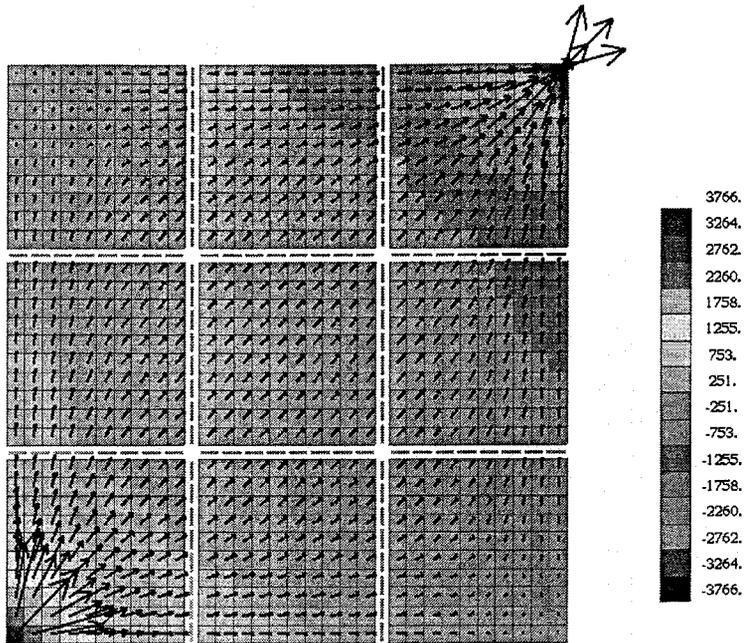


Figura 8.7: Flujo Monofásico.

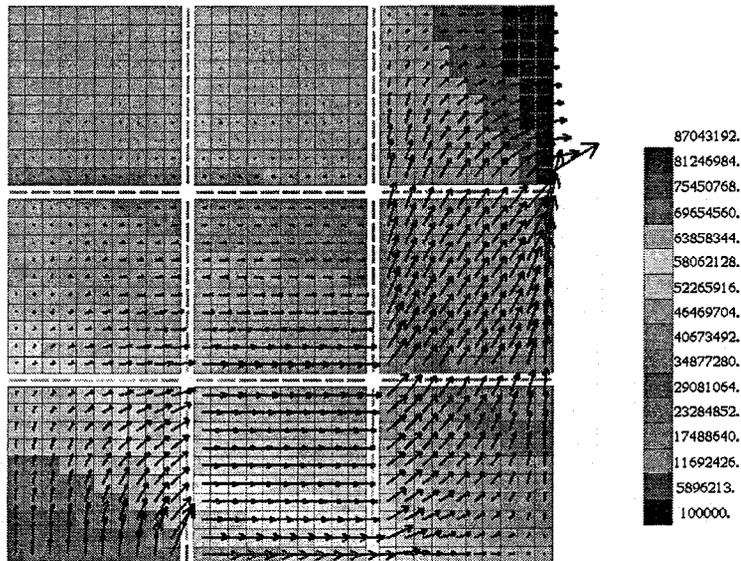


Figura 8.8: Flujo Monofásico.

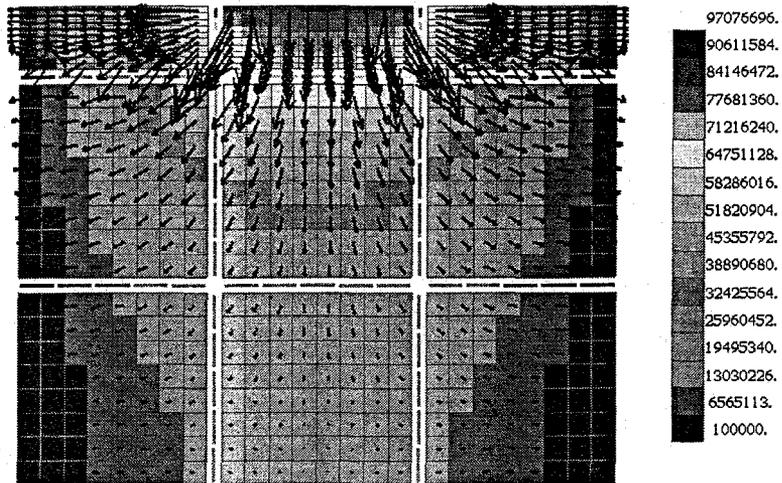


Figura 8.9: Flujo Monofásico.

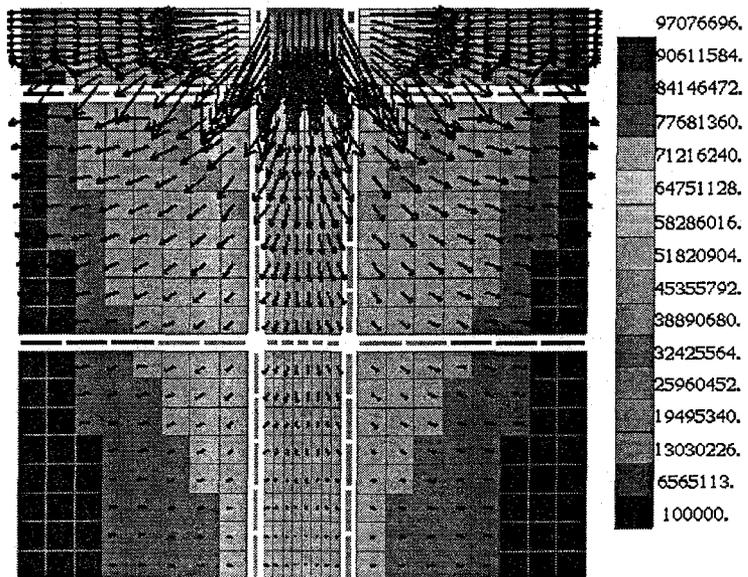


Figura 8.10: Flujo Monofásico.

Simulación de Desplazamiento Miscible Caso I

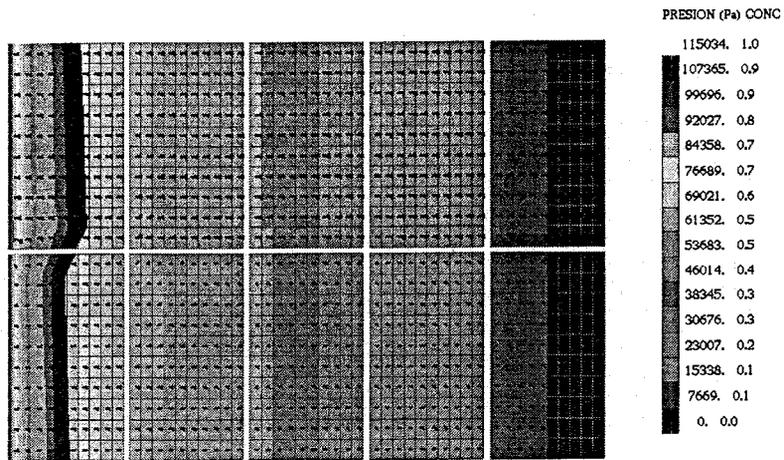


Figura 8.1 Flujo Miscible Primer Caso.

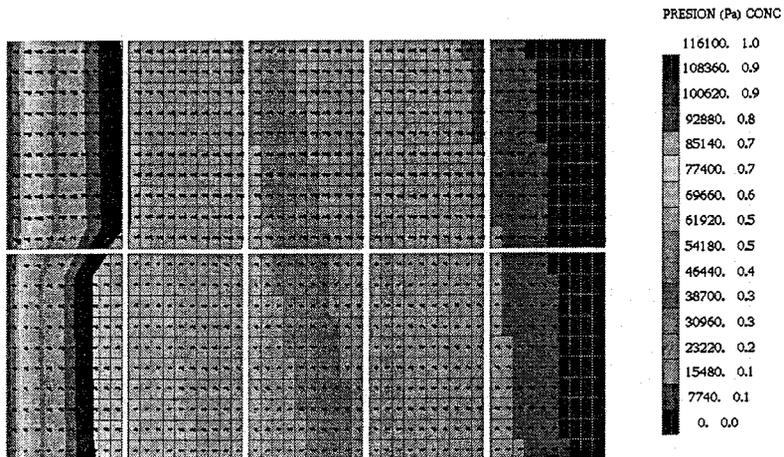


Figura 8.2. Flujo Miscible Primer Caso.

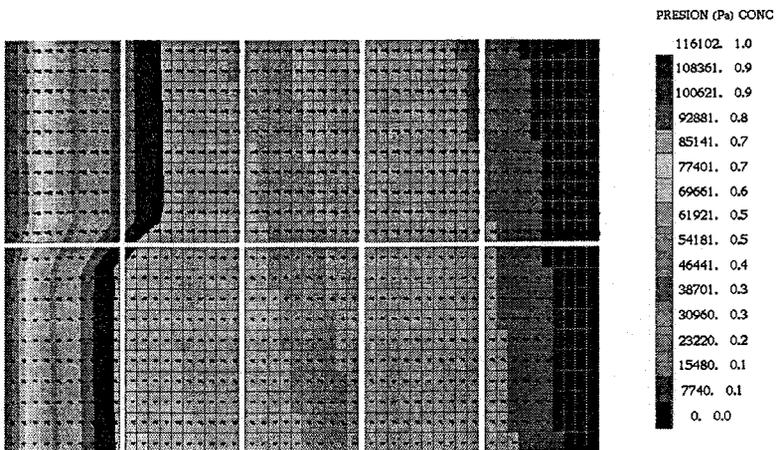


Figura 8.3. Flujo Miscible Primer Caso.

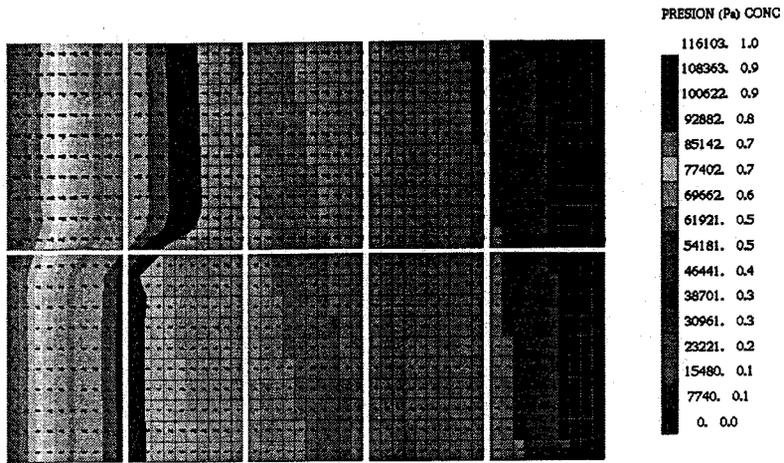


Figura 8.4. Flujo Miscible Primer Caso.

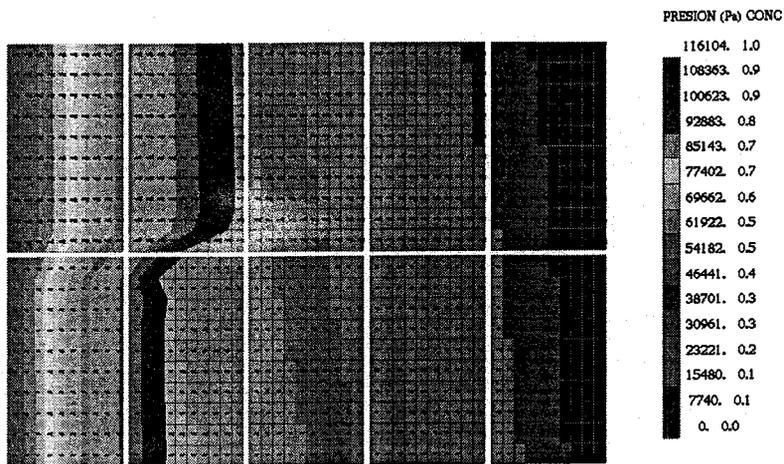


Figura 8.5. Flujo Miscible Primer Caso.

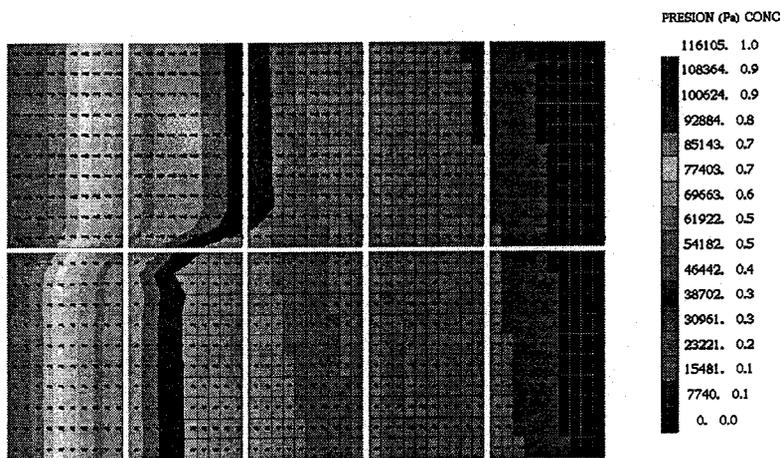


Figura 8.6. Flujo Miscible Primer Caso.

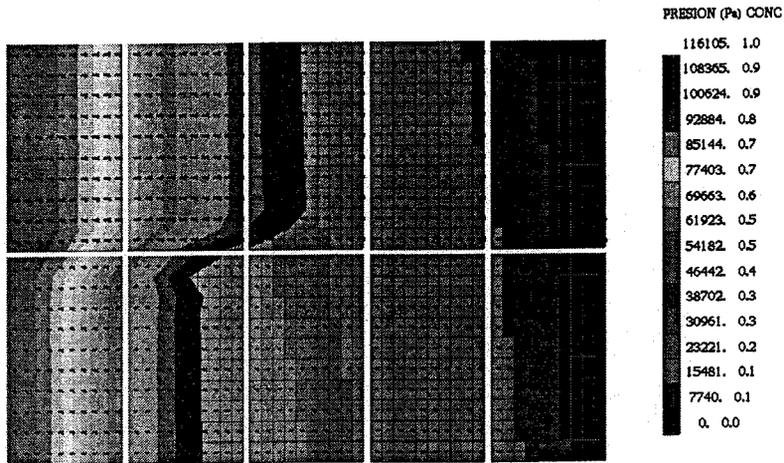


Figura 8.7. Flujo Miscible Primer Caso.

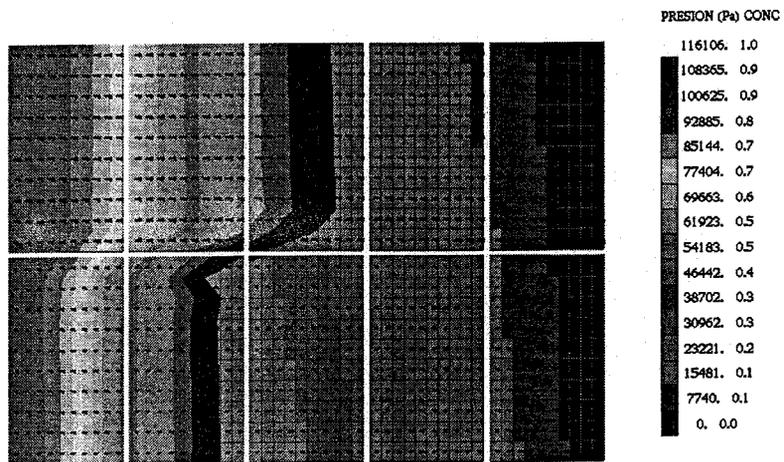


Figura 8.8. Flujo Miscible Primer Caso.

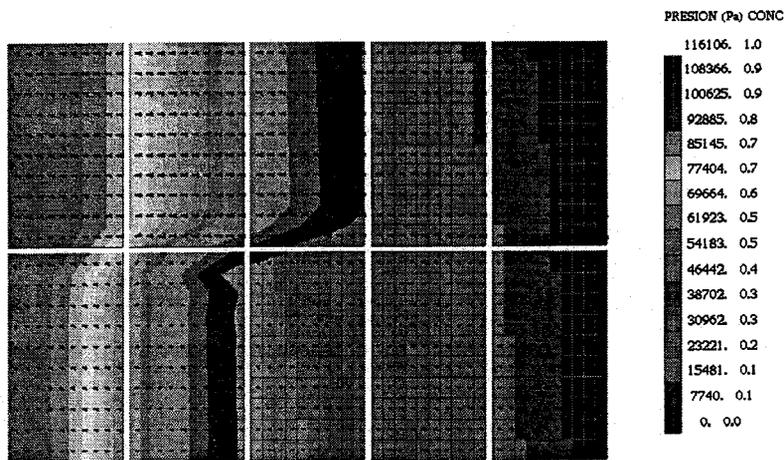


Figura 8.9. Flujo Miscible Primer Caso.

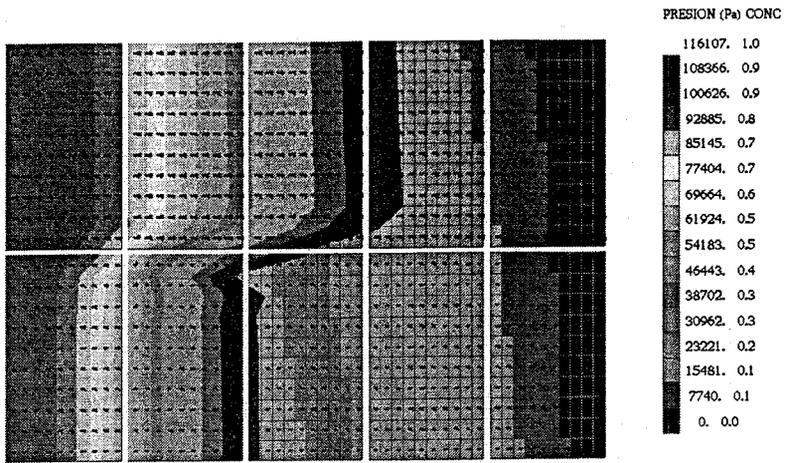


Figura 8.10. Flujo Miscible Primer Caso.

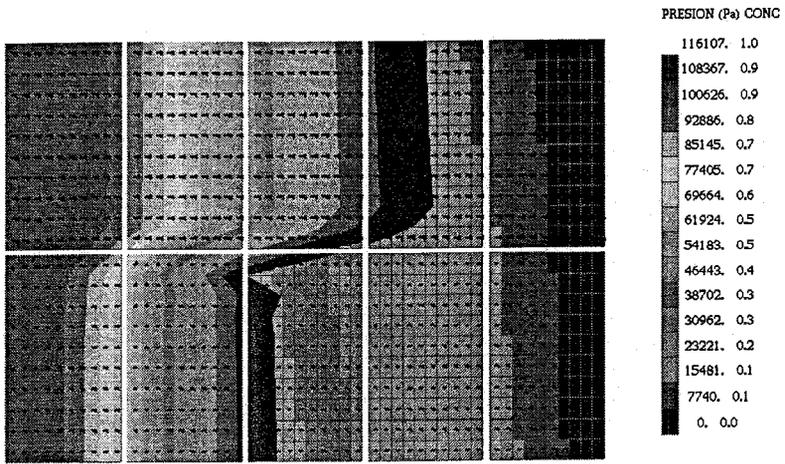


Figura 8.11. Flujo Miscible Primer Caso.

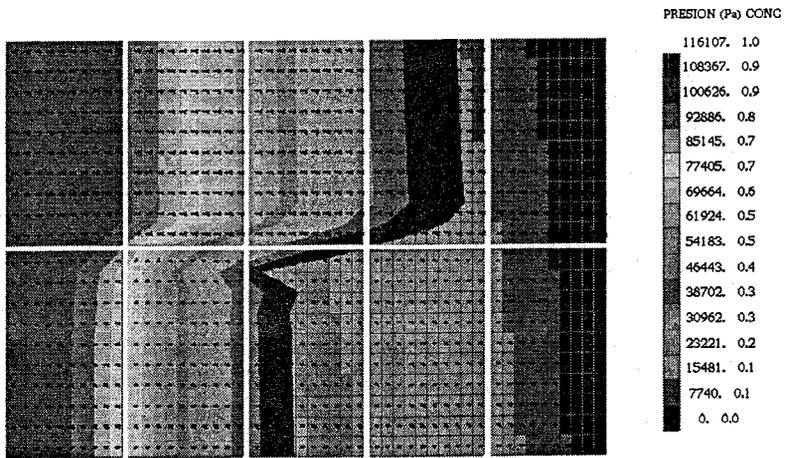


Figura 8.12. Flujo Miscible Primer Caso.

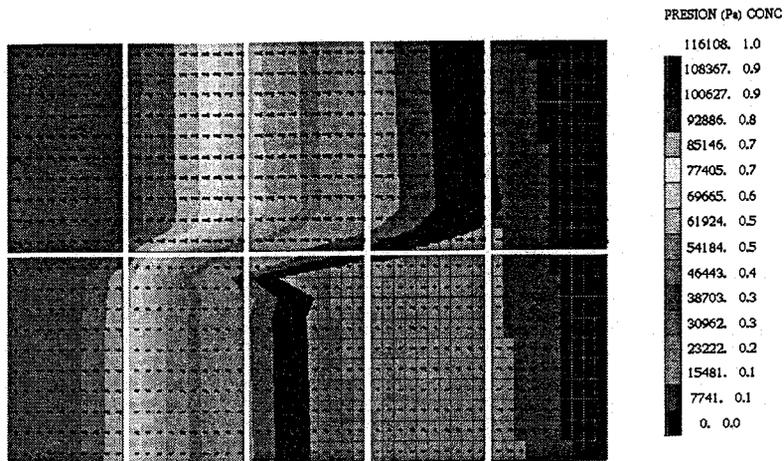


Figura 8.13. Flujo Miscible Primer Caso.

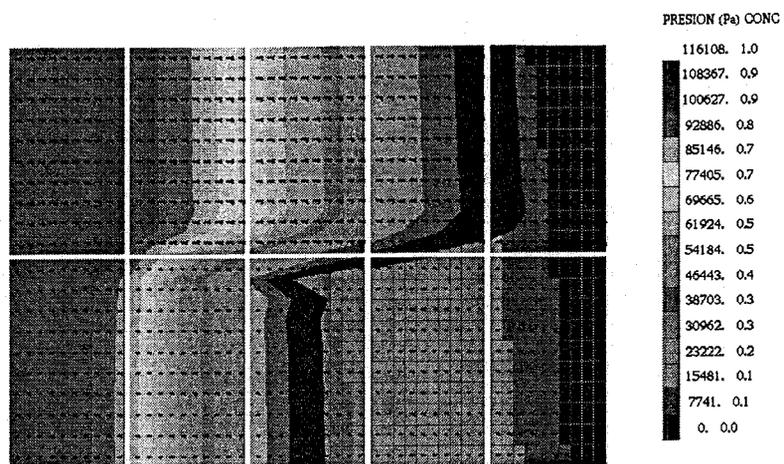


Figura 14. Flujo Miscible Primer Caso.

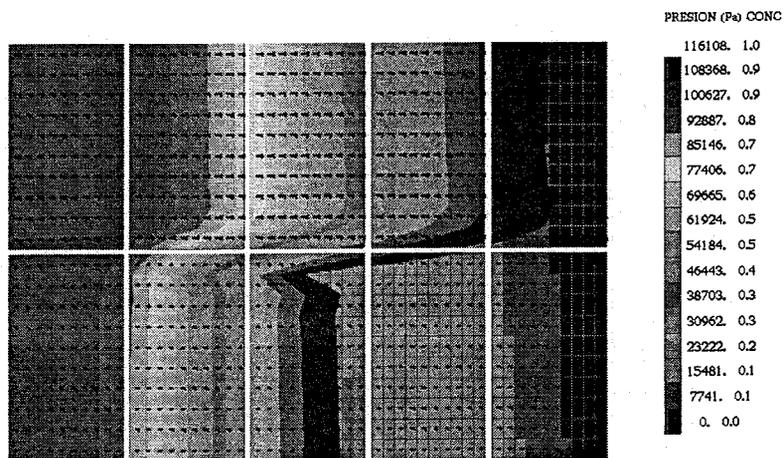


Figura 15. Flujo Miscible Primer Caso.

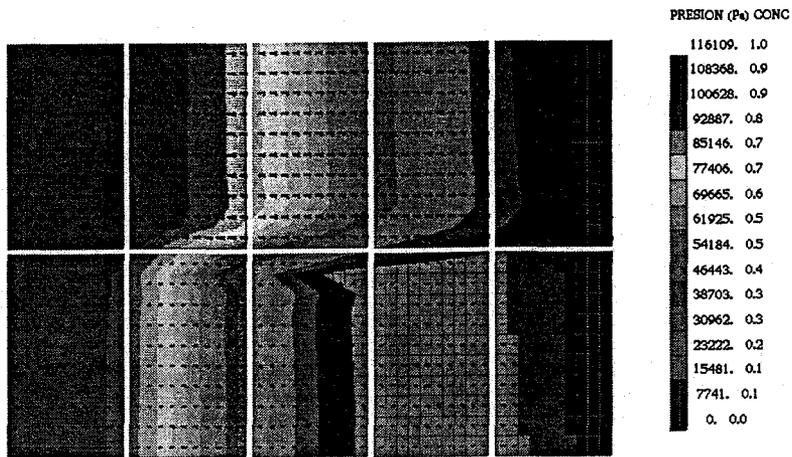


Figura 8.16. Flujo Miscible Primer Caso.

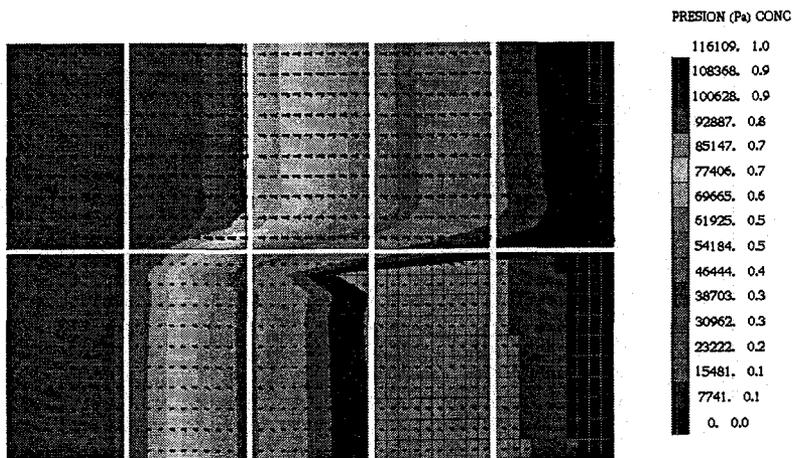


Figura 8.17. Flujo Miscible Primer Caso.

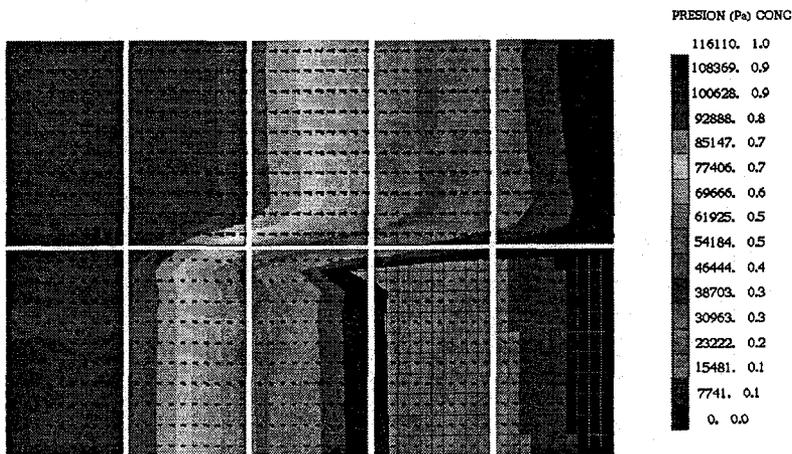


Figura 8.18. Flujo Miscible Primer Caso.

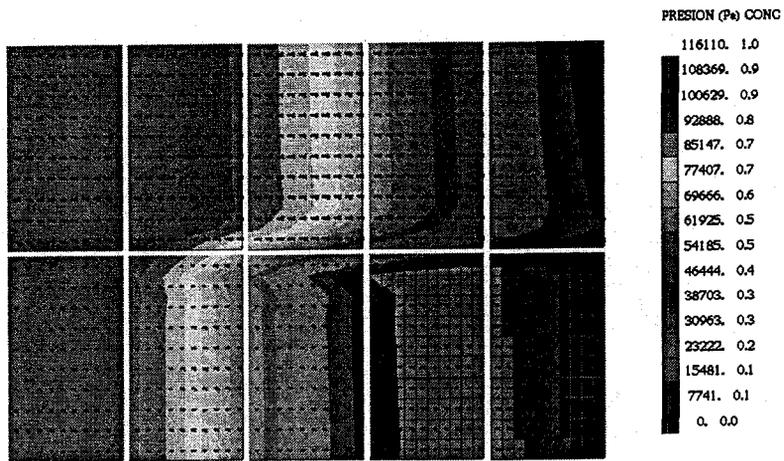


Figura 8.19. Flujo Miscible Primer Caso.

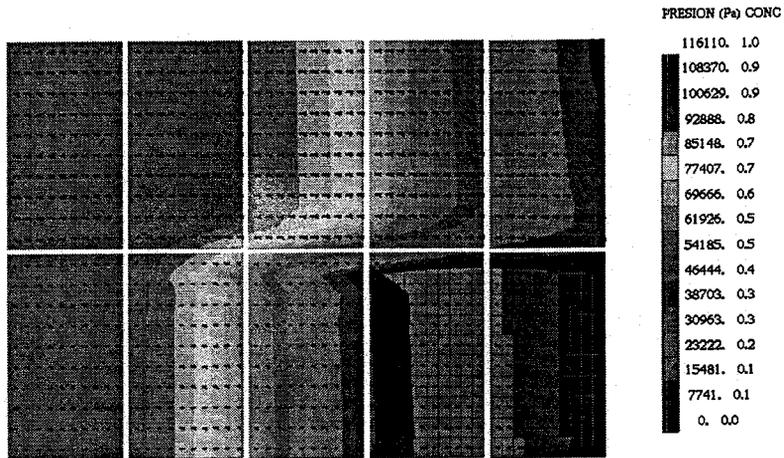


Figura 8.20. Flujo Miscible Primer Caso.

Simulación de Desplazamiento Miscible Caso II

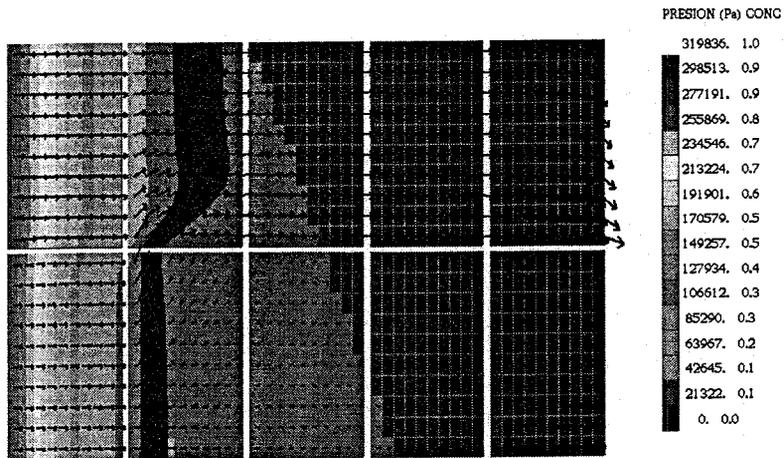


Figura 8.1. Flujo Miscible Segundo Caso.

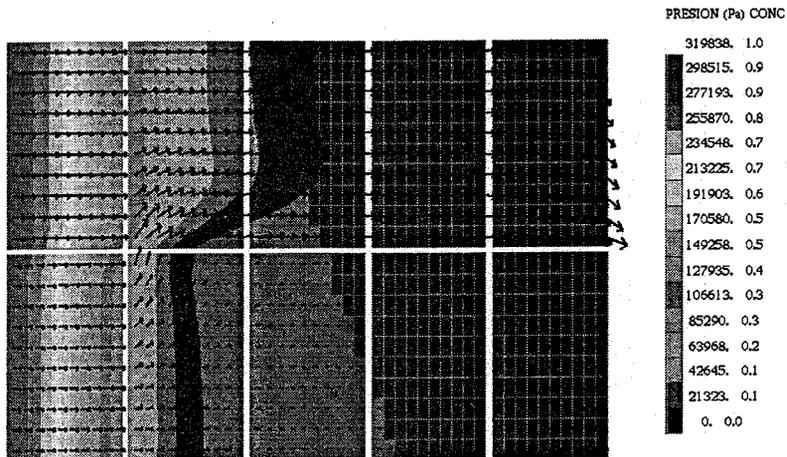


Figura 8.2. Flujo Miscible Segundo Caso.

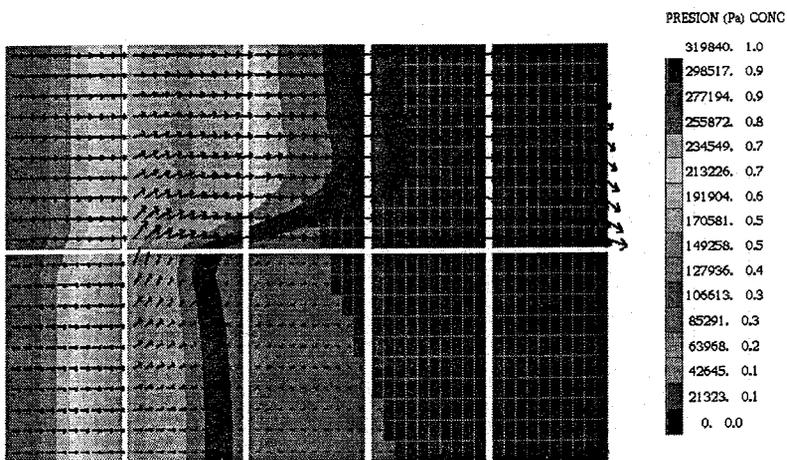


Figura 8.3. Flujo Miscible Segundo Caso.

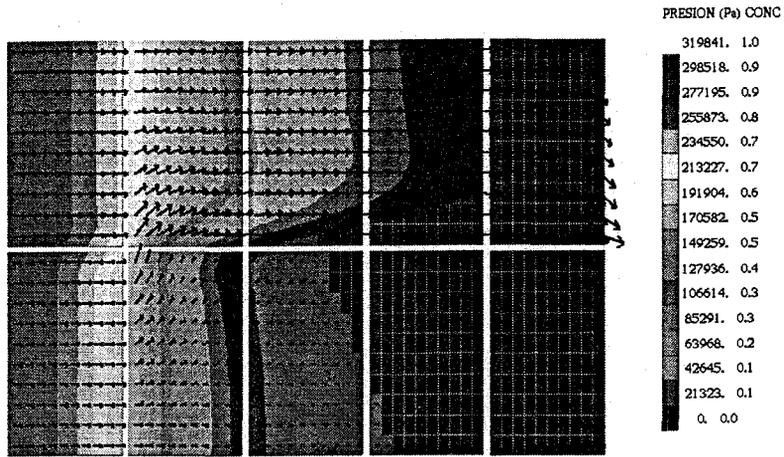


Figura 8.4. Flujo Miscible Segundo Caso.

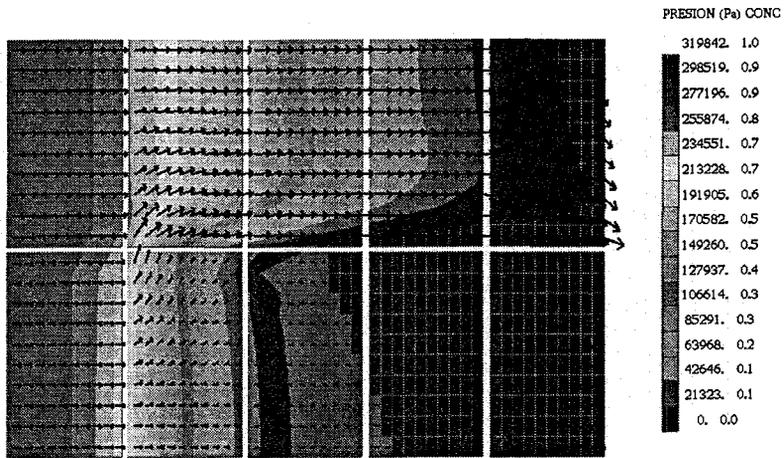


Figura 8.5. Flujo Miscible Segundo Caso.

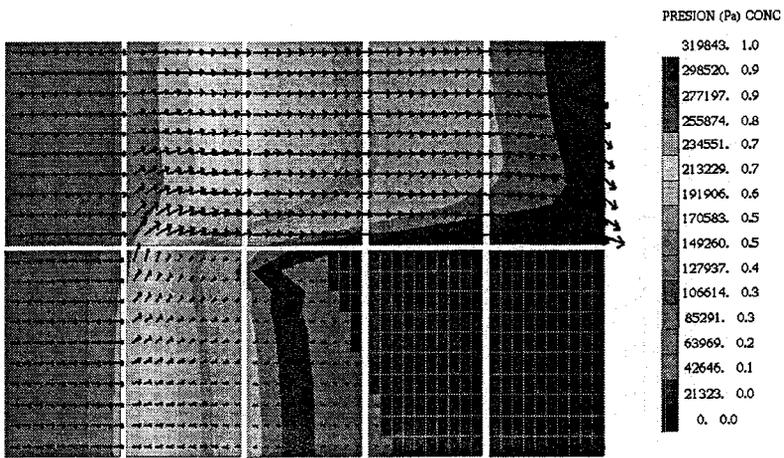


Figura 8.6. Flujo Miscible Segundo Caso.

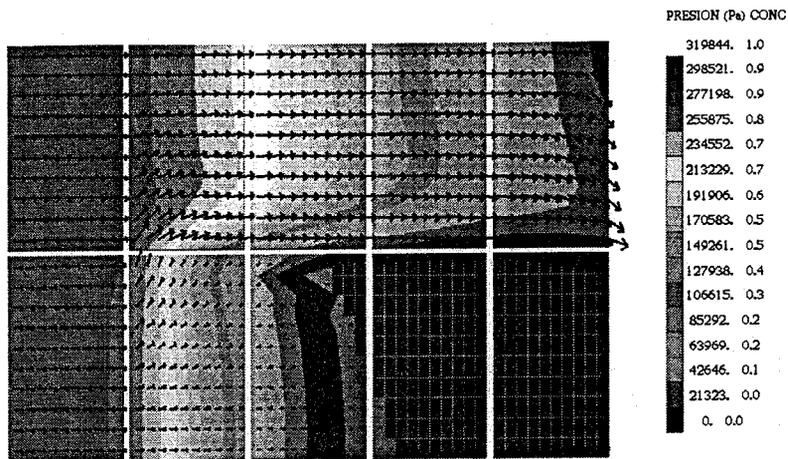


Figura 8.7. Flujo Miscible Segundo Caso.

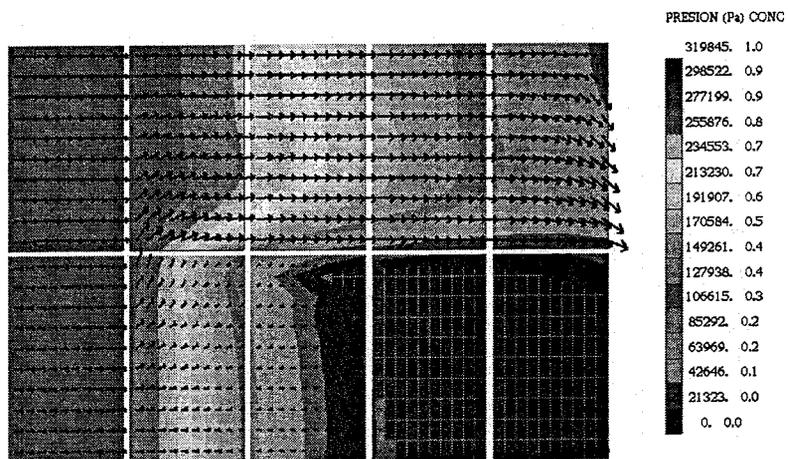


Figura 8.8. Flujo Miscible Segundo Caso.

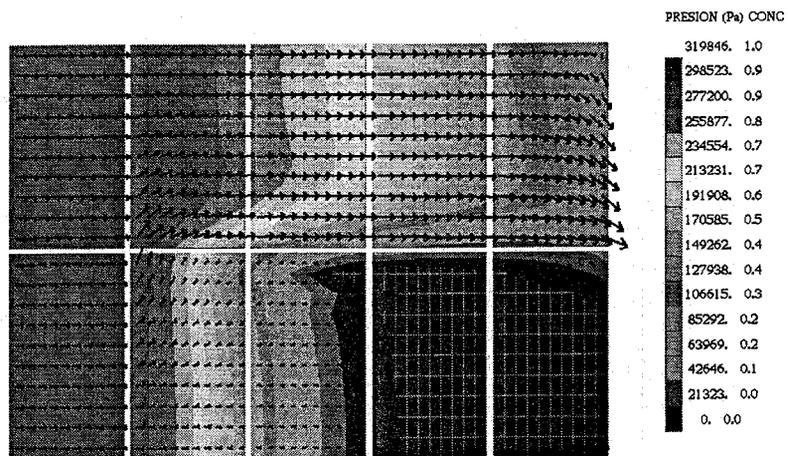


Figura 8.9. Flujo Miscible Segundo Caso.

Simulación de Desplazamiento Miscible Caso III

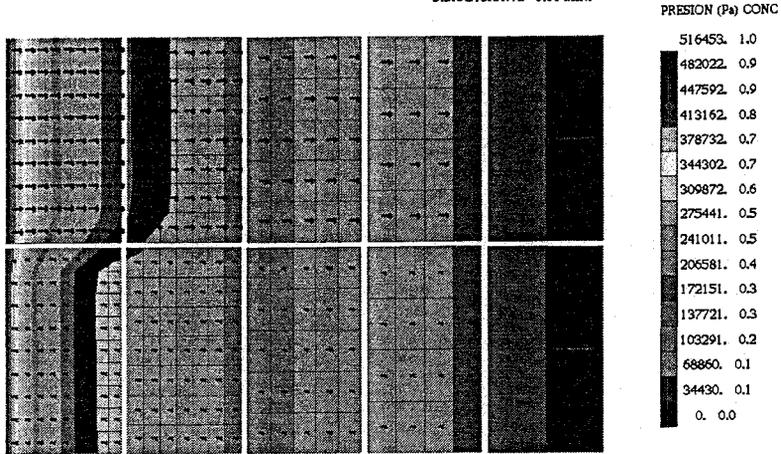


Figura 8.1. Flujo Miscible Tercer Caso.

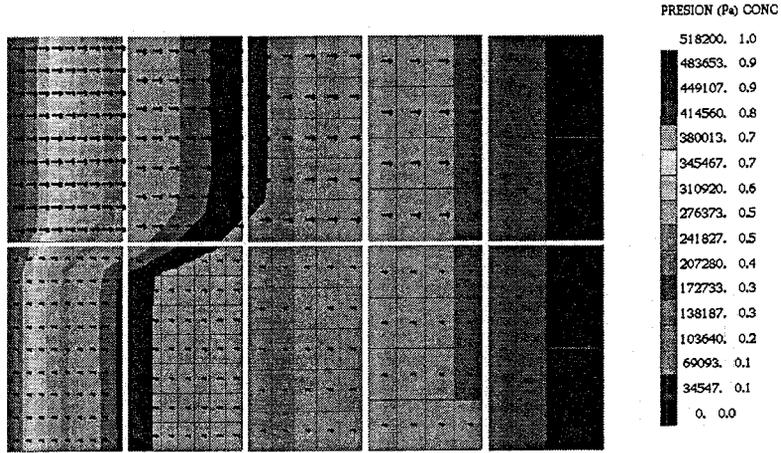


Figura 8.2. Flujo Miscible Tercer Caso.

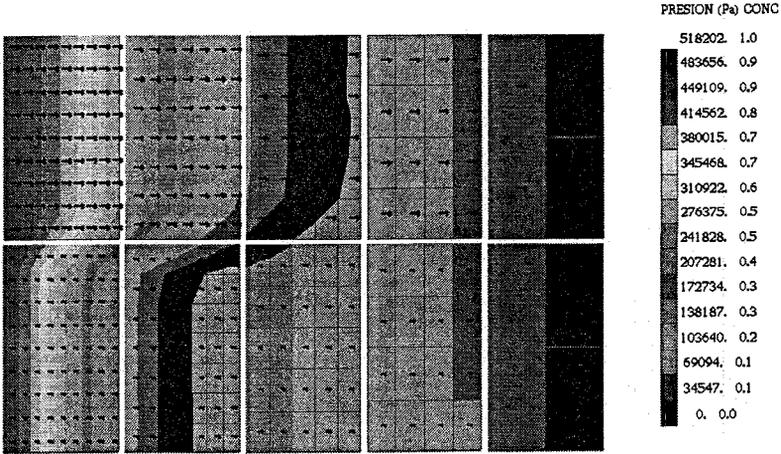


Figura 8.3. Flujo Miscible Tercer Caso.

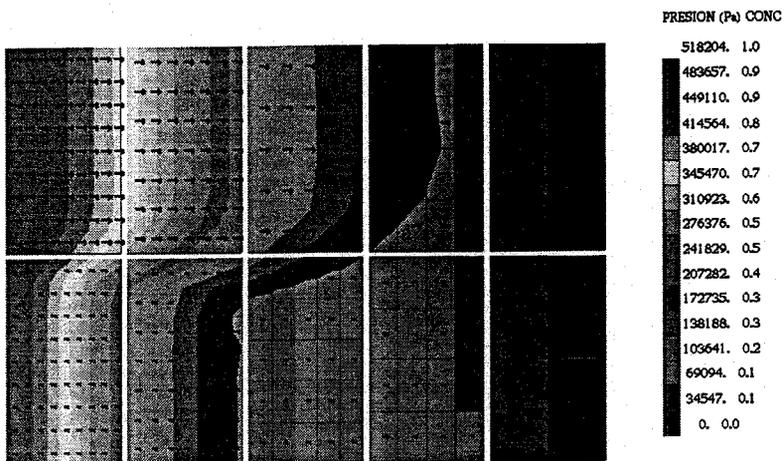


Figura 8.4. Flujo Miscible Tercer Caso.

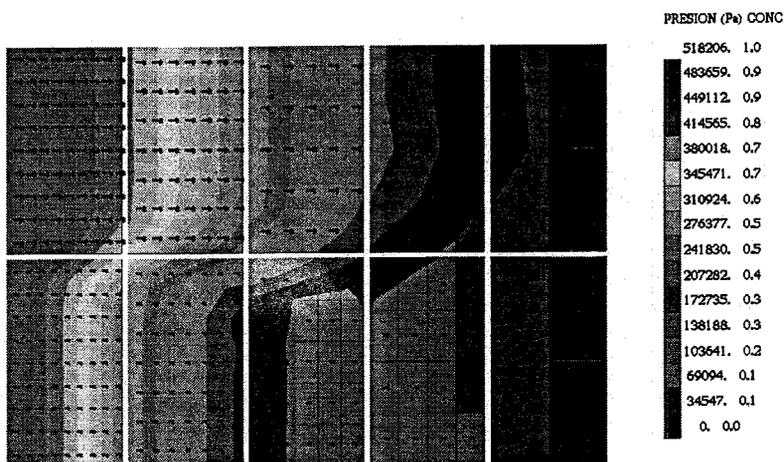


Figura 8.5. Flujo Miscible Tercer Caso.

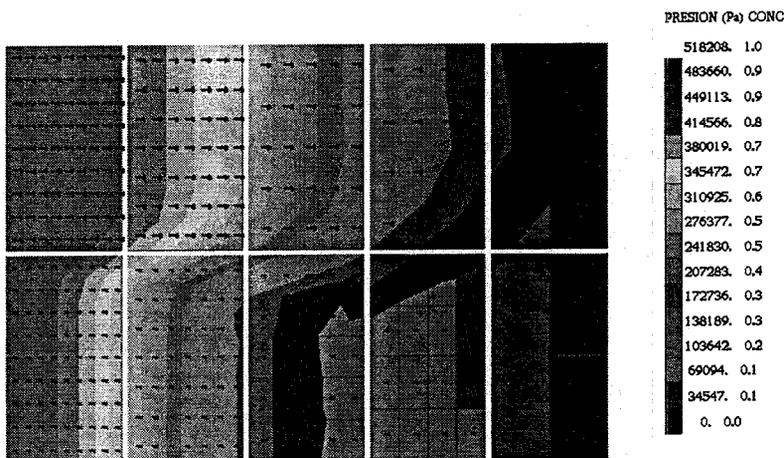


Figura 8.6. Flujo Miscible Tercer Caso.

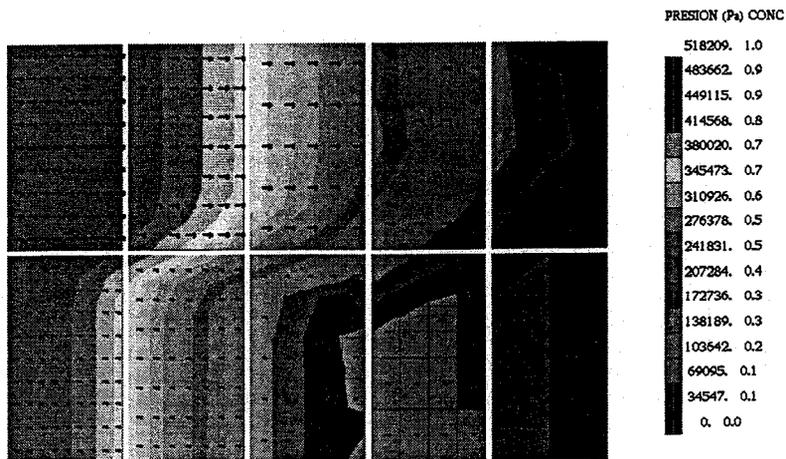


Figura 8.7. Flujo Miscible Tercer Caso.

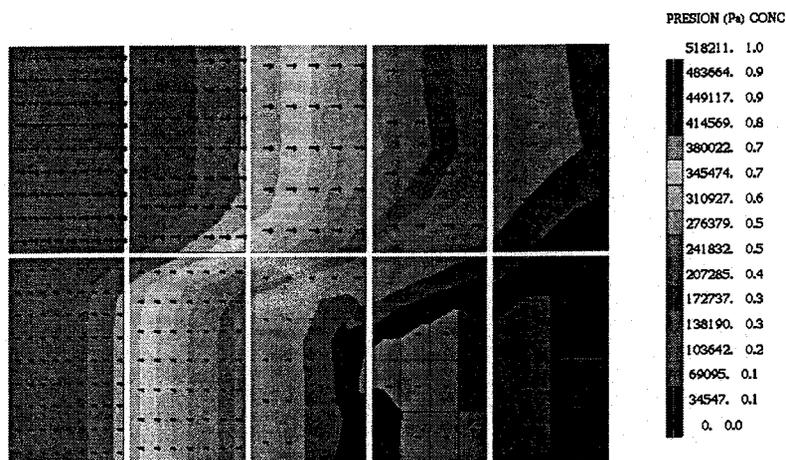


Figura 8.8. Flujo Miscible Tercer Caso.

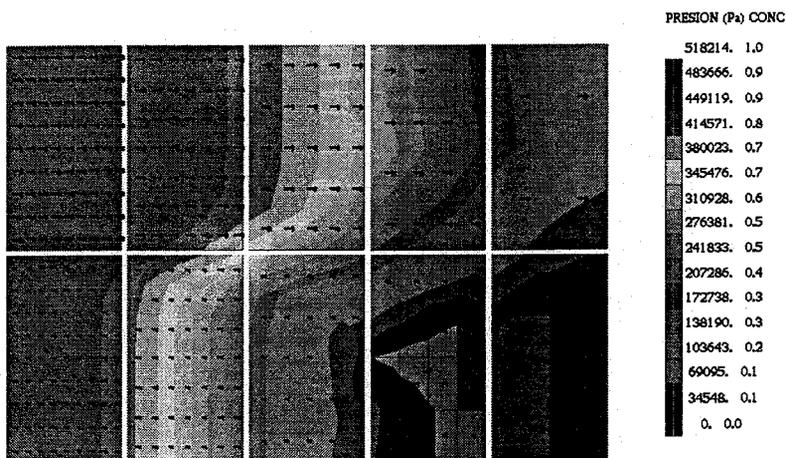


Figura 8.9. Flujo Miscible Tercer Caso.

Apéndice I: Elementos de Análisis Funcional

Para una mejor comprensión de los términos aquí utilizados, exponemos algunos conceptos y definiciones que son necesarios para entender el desarrollo del trabajo.

Funciones Convexas

Definición 1. Sea \mathbf{E} un espacio vectorial. Un subconjunto \mathbf{K} de \mathbf{E} se dice que es convexo, si dados cualesquiera $x, y \in \mathbf{K}$ el segmento $\{tx + (1-t)y : t \in [0, 1]\}$ está contenido en \mathbf{K} .

Definición 2. Sea \mathbf{K} un subconjunto convexo de un espacio vectorial \mathbf{E} y $f : \mathbf{K} \rightarrow \mathfrak{R}$. Se dice que f es una función convexa en \mathbf{K} si, para cada $x, y \in \mathbf{K}$ y $t \in (0, 1)$, se tiene que

$$f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y).$$

Si la desigualdad es estricta siempre que $x \neq y$, se dice que la función f es estrictamente convexa.

Definición 3. Una funcional real definida sobre los reales \mathfrak{R} , del tipo

$$\Psi : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}, \quad \Psi \neq +\infty, \quad (8.1)$$

no necesariamente diferenciable ni continua, se dice ser subdiferenciable en un punto $\eta \in \mathfrak{R}$ si existe un real $\eta^* \in \mathfrak{R}$ tal que la funcional afín $\xi \rightarrow \Psi(\eta) + \eta^* \{\xi - \eta\}$, de pendiente η^* , minoriza a ella en el punto η ; esto es,

$$\exists \eta^* \in \mathfrak{R} : \Psi(\xi) \geq \Psi(\eta) + \eta^* \{\xi - \eta\}, \quad \forall \xi \in \mathfrak{R}. \quad (8.2)$$

A dicho real, η^* se le denomina un subgradiente de Ψ en η , y al conjunto, posiblemente vacío, de tales subgradientes se le llama el subdiferencial de Ψ en η , y se le denota por,

$$\partial\Psi(\eta) = \{\eta^* \in \mathfrak{R} : \Psi(\xi) \geq \Psi(\eta) + \eta^* \{\xi - \eta\}\} \quad \forall \xi \in \mathfrak{R}. \quad (8.3)$$

El $\partial\Psi$ es monótona creciente y en general es una transformación multivaluada $\partial\Psi : \mathfrak{R} \rightarrow 2^{\mathfrak{R}}$ caracterizada por (8.3). Aquí $2^{\mathfrak{R}}$ denota el conjunto potencia de \mathfrak{R} , esto es la familia de todos los subconjuntos de \mathfrak{R} incluyendo el conjunto vacío \emptyset . Definiendo el dominio efectivo de $\Psi : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$ como el subconjunto

$$\mathcal{D}(\Psi) = \{\xi \in \mathfrak{R} : \Psi(\xi) < +\infty\} \quad (8.4)$$

de (8.3) se sigue que Ψ no es subdiferenciable fuera de $\mathcal{D}(\Psi)$. En efecto

$$\partial\Psi(\eta) = \emptyset, \quad \forall \eta \notin \mathcal{D}(\Psi). \quad (8.5)$$

Además la condición (8.2) de subgradiente es claramente equivalente a su restricción $\forall \xi \in \mathcal{D}(\Psi)$. Por tanto la definición (8.3) se puede describir equivalentemente en la forma:

$$\partial\Psi(\eta) = \{\eta^* \in \mathfrak{R} : \Psi(\xi) \geq \Psi(\eta) + \eta^* \{\xi - \eta\}, \forall \xi \in \mathcal{D}(\Psi)\}. \quad (8.6)$$

Ψ es diferenciable en η si y sólo si $\partial\Psi(\eta) = \{\partial\Psi'(\eta)\}$, esto es si su subgradiente en η es único y es igual a la derivada de Ψ en η . La primitiva de la función $\partial\Psi$, esto es Ψ , se llama subpotencial. Otro concepto fundamental relacionado con este trabajo es la función conjugada o polar. Para una función $\Psi : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}$, su función conjugada es definida por:

$$\Psi^* : \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R} \cup \{+\infty\}, \Psi^*(\xi^*) = \sup \{\xi^* \xi - \Psi(\xi); \xi \in \mathfrak{R}\}, \quad (8.7)$$

la cual es una función convexa con dominio efectivo, $\mathcal{D}(\Psi^*)$, no vacío y cerrado. Esta definición juega un papel central en la dualización y se hace evidente mediante el siguiente lema.

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

$$\eta \in \mathcal{D}(\Psi) : \eta^* \in \partial\Psi(\eta) \iff \eta^* \in \mathcal{D}(\Psi^*) : \eta \in \partial\Psi^*(\eta^*) \quad (8.8)$$

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

Contracción.

Definición 4. Sea (X, d) un espacio métrico. Una transformación f de X , sobre sí mismo, se llama contracción si existe un número k , $0 < k < 1$, tal que, para cada pareja de elementos $x, y \in X$, se tiene

$$d(f(x) - f(y)) \leq kd(x, y).$$

Así, una transformación contractiva "contrae distancia": la distancia entre las imágenes $f(x)$, $f(y)$ es menor, por un factor de escala k , que la distancia entre los elementos x , y . La transformación aproxima uniformemente a los puntos. Cuando k toma cualquier valor positivo (esto es, no necesariamente entre 0 y 1) la transformación se llama continua Lipschitz.

El siguiente teorema se relaciona con la definición:

Teorema. Sea (X, d) un espacio métrico completo y $f : X \rightarrow X$ una contracción. Entonces:

- a) La ecuación $x = f(x)$ tiene una y sólo una solución en X ;

b) La solución única, x , de la ecuación $x = f(x)$ puede obtenerse como el límite de una sucesión de elementos $x_n \in X$.

El teorema no sólo presenta un resultado de existencia y unicidad, también un algoritmo para obtener la solución por un procedimiento iterativo.

Espacios de Banach:

Sea X un espacio vectorial.

Definición 5. Una función $\|\cdot\| : X \rightarrow [0, +\infty)$ se dice una norma si

1. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad \forall x, y \in X$.
2. $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\| \quad \forall x \in X, \lambda \in \mathfrak{R}$.
3. $\|x\| = 0$ si y sólo si $x = 0$.

Definición 6. Una sucesión $\{x_k\}_{k=1}^{\infty} \subset X$ converge a $x \in X$ si $\|x_k - x\| \rightarrow 0$.

Definición 7. Una sucesión $\{x_k\}_{k=1}^{\infty} \subset X$ se dice de Cauchy si para todo $\epsilon > 0$ existe $k_0 > 0$ tal que $\|x_k - x_l\| < \epsilon \quad \forall k, l \geq k_0$.

Definición 8. X se dice completo si toda sucesión de Cauchy es convergente, es decir, si para toda $\{x_k\}_{k=1}^{\infty} \subset X$ de Cauchy, existe $x \in X$ tal que $x_k \rightarrow x$. Un espacio vectorial normado completo es un espacio de Banach.

Espacios de Hilbert:

Sea H un espacio vectorial.

Definición 9. Una función $(,) : H \times H \rightarrow \mathfrak{R}$ se dice un producto interno si

1. $(x, y) = (y, x) \quad \forall x, y \in H$.
2. $x \rightarrow (x, y)$ es lineal para cada $y \in H$.
3. $(x, x) \geq 0 \quad \forall x \in H$.
4. $(x, x) = 0$ si y sólo si $x = 0$.

Definición 10. Si $(,)$ es un producto interno, la norma asociada es

$$\|x\| = (x, x)^{1/2} \quad (x \in H).$$

La desigualdad de Cauchy-Schwartz dice:

$$|(x, y)| \leq \|x\| \|y\| \quad (x, y \in H).$$

Definición 11. Un espacio de Hilbert H es un espacio de Banach, cuya norma es obtenida por un producto interno.

Definición 12. Sea H un espacio de Hilbert separable.

a) Dos elementos $x, y \in H$ son ortogonales si $(x, y) = 0$.

b) Una sucesión $\{w_k\}_{k=1}^{\infty} \subset H$ se dice un sistema ortonormal si

$$(w_k, w_l) = 0 \quad k \neq l, \quad \|w_k\| = 1.$$

c) Un sistema ortonormal $\{w_k\}_{k=1}^{\infty} \subset H$ se dice una base ortonormal, si dado $x \in H$ existe $\alpha_k \in \mathbb{R}$ tales que

$$x = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k w_k.$$

En ese caso se verifica que $\alpha_k = (x, w_k)$.

Proposición 13. Sea H un espacio de Hilbert separable y $\{w_k\}_{k=1}^{\infty} \subset H$ un sistema ortonormal. Son equivalentes:

1. $\{w_k\}_{k=1}^{\infty} \subset H$ es una base ortonormal.
2. Si $(x, w_k) = 0 \quad \forall k \in \mathbb{N}$, entonces $x = 0$.

Definición 14. Sea $A : X \rightarrow X$ un operador acotado.

a) El conjunto resolvente de A es

$$\rho(A) = \{\eta \in \mathbb{R} \mid (A - \eta I) \text{ es biyectivo}\}.$$

b) El espectro de A es $\sigma(A) = \mathbb{R} - \rho(A)$. Si $\eta \in \rho(A)$, la inversa $(A - \eta I)^{-1} : X \rightarrow X$ es un operador acotado.

Definición 15. Sea $\mathcal{A} : H \rightarrow H$ un operador acotado. Su adjunto $\mathcal{A}' : H \rightarrow H$ se define como el único operador que verifica $(y, \mathcal{A}x) = (\mathcal{A}'y, x)$ para todo $x, y \in H$.

Operadores Maximales Monótonos

Definición 16. Sea $A : \mathcal{D}(A) \subset H \rightarrow H$ un operador lineal no acotado. Se dice que A es monótono si

$$(Av, v) \geq 0 \quad \forall v \in \mathcal{D}(A),$$

A es maximal monótono si además $R(I + A) = H$, es decir $\forall f \in H, \exists u \in \mathcal{D} : u + Au = f$.

Proposición 17. Sea A un operador maximal monótono. Entonces

a) $\mathcal{D}(A)$ es denso en H .

b) A es cerrado.

b) Para todo $\lambda > 0$, $(I + \lambda A)$ es biyectivo de $\mathcal{D}(A)$ sobre H , $(I + \lambda A)^{-1}$ es un operador acotado y $\|(I + \lambda A)^{-1}\|_{\mathcal{L}(H)} \leq 1$.

Definición 18. Sea A un operador maximal monótono, entonces para todo $\lambda > 0$

$$J_\lambda = (I + \lambda A)^{-1}$$

es el resolvente de A .

Definición 19. Sea V un espacio de Banach y sea J la inyección canónica de V en V^{**} . Se dice que V es reflexivo si $J(V) = V^{**}$. Cuando V es reflexivo se identifican implícitamente V y V^{**} (con ayuda del isomorfismo J).

Definiciones.

Los espacios que se utilizan en este trabajo son Banach y de Hilbert. El marco funcional en el cual se plantean las formulaciones variacionales globales y locales está constituido por espacios $V(\Omega)$ y $Y(\Omega)$ reflexivos de Banach, con sus respectivos espacios duales $V^*(\Omega)$ y $Y^*(\Omega)$. $H^{1/2}(\Gamma)$ es un espacio de Hilbert y su dual es $H^{-1/2}(\Gamma)$. El espacio $H(\text{div}; \Omega)$ es definido por

$$H(\text{div}; \Omega) = \left\{ v = (v_i)_{1 \leq i \leq n} \in (L^2(\Omega))^n : \text{div} v = \sum_{i=1}^n \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \in L^2(\Omega) \right\}$$

que también es un espacio de Hilbert.

Las formulaciones variacionales mixtas macrohíbridas son planteadas en espacios funcionales locales, estos espacios son:

El espacio de velocidad y el de presión que son definidos por

$$\begin{aligned} V(\Omega_e) &= \{v \in L^2(\Omega_e) : \operatorname{div}(v) \in L^2(\Omega_e)\} \text{ y} \\ Y(\Omega_e) &= L^2(\Omega). \end{aligned}$$

Los espacios de frontera interna de velocidad y presión por

$$\begin{aligned} B(\Gamma_e) &= H^{1/2}(\Gamma_e) \text{ y su dual} \\ B^*(\Gamma_e) &= H^{-1/2}(\Gamma_e) \end{aligned}$$

ambos espacios asociados al espacio local de concentración $V(\Omega_e) = H^1(\Omega_e)$.

Para mayor información ver [15, 23]