



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA

RESOLUCIÓN DE DOS PROBLEMAS INVERSOS DEFINIDOS PARA MEDIOS
POROSOS MEDIANTE HOMOGENEIZACIÓN: ANÁLISIS Y APLICACIONES

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA, MENCIÓN MATEMÁTICAS
APLICADAS

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO

VICENTE ESTEBAN OCQUETEAU CANALES

PROFESOR GUÍA:
RAÚL GORMAZ ARANCIBIA

PROFESOR CO-GUÍA:
CARLOS CONCA ROSENDE

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
JORGE SAN MARTÍN HERMOSILLA
ROBERTO ARAYA SCHULZ

Este trabajo ha sido financiado por CMM ANID PIA AFB17000; CMM ANID BASAL
ACE210010 y CMM ANID BASAL FB210005

SANTIAGO DE CHILE

2023

Resumen

La lixiviación in situ es un proceso en el que se extraen minerales del medio directamente. Cuando el medio está en el subsuelo, muchas veces, para evaluar un proyecto de lixiviación in situ, es útil conocer de antemano las propiedades de dicho medio, y estas propiedades no siempre se pueden obtener directamente. Esto motiva a definir problemas inversos asociados a ecuaciones en derivadas parciales para estimar las propiedades del subsuelo a partir de propiedades o fenómenos que sí se pueden medir directamente. Estos medios suelen ser anisotrópicos y altamente oscilatorios a nivel microscópico, lo que se debe tener en cuenta al momento de definir el problema inverso. Con estas consideraciones, se plantean problemas inversos definidos en dos escalas: una escala macroscópica y una microscópica. Más específicamente, dos propiedades del subsuelo de interés son la conductividad hidráulica y la dispersión. La primera está asociada a la Ley de Darcy, que tiene una versión estacionaria y una transiente. La segunda está asociada a la ley de Fick, y es dependiente del tiempo.

Abdulle y Di Blasio [4] estudiaron numéricamente un problema inverso elíptico que permite estimar el parámetro que define la ecuación que, en particular, aplica para la estimación de la conductividad hidráulica en la Ley de Darcy para el caso estacionario. Inspirado en este trabajo, la presente tesis sigue un tipo de análisis análogo aplicado a un problema parabólico, que aplica para estimar la conductividad hidráulica en la ley de Darcy para el caso transiente, y la dispersión en la ley de Fick. Estas aplicaciones son casos particulares, por lo que sólo sirven de motivación. La tesis trabaja con los modelos en abstracto, permitiendo así que sean aplicables en otros contextos.

Con todo esto, el trabajo de esta tesis se puede ver como una revisión y una extensión de gran parte del trabajo hecho por Abdulle y Di Blasio para ciertos fenómenos de difusión. Los resultados de esta tesis son análogos en cuanto al análisis teórico y numérico del problema, así como su validación experimental.

En memoria de Assyr Abdulle (1971 - 2021). A pesar de no haber tenido la oportunidad de conocerlo, su trabajo definió el rumbo de esta tesis.

Agradecimientos

En primer lugar, agradezco a mis profesores guías y co-guías, Raúl Gormaz y Carlos Conca, por el constante apoyo durante este proceso, siempre comprensivos en momentos en los que no pude mantener el ritmo de trabajo ideal, por resolver mis dudas, y en general, por hacerle justicia a la palabra “guía”. También agradezco a Jorge San Martín, por haber sido un gran aporte durante las etapas más avanzadas en la elaboración de la tesis.

Mi paso por la universidad estuvo rodeado de amigos, con los que estoy eternamente agradecido, porque hicieron de mi estadía en la universidad (y más allá) algo mucho más enriquecedor que lo meramente académico. Me refiero a mis amigos cercanos que conocí siendo mechón y a mis amigos que hice en la especialidad, con una mención especial a Felipe Olivares y Reidmen Aróstica, porque ambos, además de ser grandes amigos, estuvieron siempre dispuestos a responder mis dudas en el ámbito computacional en la elaboración de esta tesis. Tampoco puedo olvidar a mis amigos que conocí en el colegio, con los que sólo hemos fortalecido nuestra amistad a lo largo de todos estos años.

Estoy muy agradecido de mi profesora de piano, Paulina Zamora, por ser la gran profesora que es, siempre comprensiva con el hecho de que mis estudios de piano los he desarrollado de manera paralela a mis estudios de ingeniería, y ha hecho lo imposible para permitirme compatibilizar ambos mundos.

Finalmente, agradezco al privilegio de familia que tengo. A mis hermanos (Sebas, Marto y Meno), mi hermana (Maco), y a mi padre y madre, quienes siempre han sido un apoyo incondicional en todo lo que hago, me han guiado, me han dado todo lo que necesito y más. Ellos me han permitido ser quien soy.

Tabla de Contenidos

Introducción	1
1. Preliminares	5
1.1. Modelos	5
1.1.1. Modelo hidrodinámico	5
1.1.2. Modelo de transporte	6
1.2. Elementos de Teoría de Homogeneización: Aspectos teóricos y numéricos . .	7
2. Problema inverso elíptico	10
2.1. Análisis	10
2.1.1. Homogeneización del problema	10
2.1.2. Regularización de Tikhonov	17
2.2. Análisis numérico	18
2.2.1. Discretización Espacial	18
2.2.2. Aproximación de flujos en la frontera	19
2.2.3. Resolución del problema inverso discretizado	21
2.3. Experimentos numéricos	24
2.3.1. Caso simplificado	24
2.3.2. Caso multiescala	25
3. Problema inverso parabólico	30
3.1. Análisis	30

3.1.1.	Estabilidad del problema inverso parabólico, caso no multiescala	31
3.1.2.	Homogeneización del problema	34
3.1.3.	Aplicación del resultado de estabilidad al caso multiescala	35
3.1.4.	Regularización de Tikhonov	43
3.2.	Análisis numérico	43
3.2.1.	Discretización Espacial	43
3.2.2.	Aproximación de flujos en la frontera	46
3.2.3.	Discretización temporal	49
3.2.4.	Resolución del problema inverso discretizado	50
3.3.	Experimentos numéricos	56
	Conclusiones	60
	Bibliografía	63
	ANEXOS	64
A.	Método de NGCI	64
B.	Elección de los términos fuentes para el problema inverso parabólico .	67
C.	Idea de aplicación para el proyecto de LIS	80

Índice de Tablas

2.1. Errores en norma $L^2(\Omega)$ del parámetro σ estimado y la solución de la ecuación del problema directo correspondiente u_σ , para distintos valores de γ . En todos los casos, se utilizó $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$	25
--	----

Índice de Ilustraciones

2.1.	En (a) se visualiza la función a estimar discretizada σ^H . En (b) se visualiza la función obtenida m^H al minimizar Ψ^H con $\gamma = 10^{-8}$, y $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$	25
2.2.	En (a), (b) se visualizan las componentes de los tensores multiescala para $\varepsilon = 10^{-1}$. En (b) y (c), se visualizan las componentes del tensor homogeneizado.	26
2.3.	Errores en norma $L^2(\Omega)$ y $H^1(\Omega)$ entre las soluciones del problema directo multiescala y homogeneizado, ambos definidos por el parámetro σ . En todos los casos, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h = H\varepsilon$	27
2.4.	Errores de estimación para distintos valores de γ . En (a) se visualizan los errores del parámetro m^H obtenido, y en (b), para las soluciones del problema directo homogeneizado respectivo $u_m^{0,H}$. Para todos los valores de γ , se consideró $\varepsilon = 10^{-8}$, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h \approx 2,2 \cdot 10^{-10}$	28
2.5.	Errores de estimación para distintos valores de ε . En (a) se visualizan los errores del parámetro m^H obtenido, y en (b), para las soluciones del problema directo homogeneizado respectivo $u_m^{0,H}$. Para todos los valores de ε , se consideró $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-8}$, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h = \varepsilon H$	29
3.1.	Errores de estimación para distintos valores de ε . En (a) (resp. (c)) se visualizan los errores (resp. errores relativos) del parámetro m^H obtenido como solución al problema inverso. En (b) (resp. (d)) se visualizan los errores (resp. errores relativos) de las soluciones del problema directo homogeneizado $u_m^{0,H}$ asociadas al parámetro m^H . Se utilizó $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-7}$, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y para cada ε , se tomó $h = \varepsilon H$	57
3.2.	Errores de estimación para distintos valores de γ . En (a) (resp. (c)) se visualizan los errores (resp. errores relativos) del parámetro m^H obtenido como solución al problema inverso. En (b) (resp. (d)) se visualizan los errores (resp. errores relativos) de las soluciones del problema directo homogeneizado $u_m^{0,H}$ asociadas al parámetro m^H . Se utilizó $\varepsilon = 10^{-8}$, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h = \varepsilon H$	58
3.	Vista superior del dominio Ω . Las porciones de en la zona de lixiviación de los pozos de extracción $\{E_i\}_{i=1}^4$ corresponden a los cilindros anaranjados, del pozo de inyección I al cilindro azul, y de los pozos de observación $\{O_i\}_{i=1}^4$ a los cilindros verdes.	84

4. Visualización tridimensional del dominio Ω . Las flechas indican las direcciones de los flujos de los líquidos en los pozos de inyección y de extracción. El líquido ingresa a partir del pozo de inyección a la zona de lixiviación, pasando por los pozos de observación, finalmente llegando a los pozos de extracción, donde se recupera el fluido con el mineral extraído mediante lixiviación. 84

Introducción

La Lixiviación In Situ (LIS) es un proceso de extracción utilizado para recuperar minerales, como el cobre, a través de pozos perforados en un depósito. Este proceso funciona mediante la disolución artificial de minerales que se producen naturalmente en estado sólido, sin necesidad de extraer la porción del subsuelo donde se encuentra el mineral.

El objetivo de esta tesis es estimar parámetros que definen un problema elíptico y uno parabólico. Ambos problemas modelan fenómenos presentes en el proceso de LIS. Para lograr dicho objetivo se estudia un problema inverso multiescala para cada problema, a partir de los cuales se propone un método para su resolución.

Motivación

La motivación para el desarrollo de esta tesis surge a partir de un proyecto desarrollado por el Centro de Modelamiento Matemático (CMM) en conjunto con Codelco hasta el año 2011, y que luego fue abandonado. Este proyecto buscaba establecer un modelo que permitiera realizar predicciones sobre distintos datos de interés presentes en procesos de LIS, como por ejemplo, la cantidad de mineral obtenida (como el cobre), su tasa de obtención, los caudales necesarios para poder realizar el proceso, entre otros datos.

La obtención de los datos anteriormente mencionados requieren el conocimiento de propiedades del subsuelo donde se realiza el proceso de lixiviación, como la conductividad hidráulica y la difusión. Estos parámetros pueden ser muy costosos de obtener directamente en toda la zona de lixiviación, tanto desde el punto de vista ambiental como económico. Por esto, es necesario encontrar una manera de estimarlos contando con una cantidad limitada de mediciones directas.

La modelación del método de LIS del proyecto fue organizada en torno a cuatro temas fundamentales:

1. **Modelo Hidrodinámico:** modela el comportamiento del flujo en un medio poroso y un medio poroso-fracturado. En el proyecto realizado el año 2011, se utilizaron los softwares comerciales 3FLO y Matlab para este modelo.
2. **Modelo de Transporte:** modela el transporte de las especies disueltas en el fluido. Estos desarrollos fueron programados utilizando C++.

3. **Modelo Químico:** modela las reacciones químicas entre el ácido y el mineral, con el fin de obtener curvas de recuperación de cobre y consumo de ácido, considerando las concentraciones de todas las especies involucradas en el proceso. Los modelos se construyeron utilizando C++.
4. **Modelo Económico:** se realiza un exhaustivo análisis técnico-económico del proceso considerando las variables de operación y económicas involucradas, tales como costos de habilitación, costos de operación, etc.

La presente tesis se centrará en el modelo hidrodinámico y el de transporte. Más específicamente, en la estimación de algunos de los parámetros que definen ambos modelos, a saber, la conductividad hidráulica (denotada por K) para el modelo hidrodinámico y la difusión (denotada por D) para el modelo de transporte. Cabe mencionar que ambos modelos están secuencialmente conectados, pues el campo de velocidades obtenido a partir del primero forma parte del segundo.

En el proyecto realizado el 2011, la estimación de dichos parámetros se realizaba como sigue: mediante pruebas de bombeo, se determinan los caudales en una vecindad de los pozos de extracción, y a partir de éstos, se completa el valor de los parámetros en el resto del dominio mediante interpolación. En el caso de la conductividad hidráulica, los valores intermedios se completan mediante interpolación lineal o cuadrática. Para la estimación de la difusión se realiza una partición del dominio, donde cada elemento de la partición contenía un pozo de extracción, y se asume un valor constante para la difusión en cada elemento de la partición.

El presente trabajo propone una manera alternativa de estimar dichos valores: mediante la resolución de dos problemas inversos multiescala. Más específicamente, de dos escalas: una macroscópica y otra microscópica, asociados cada uno a una Ecuación en Derivadas Parciales (EDP), con condiciones de borde sobre cierto dominio y, cuando existe variable temporal, con condiciones iniciales. Dichos problemas inversos multiescala serán el objeto de estudio de la presente tesis. Cabe señalar que estos problemas en principio pueden modelar problemas de contextos ajenos a los que motivaron esta tesis, por lo que se espera que los resultados sean también aplicables en dichos contextos. Es por esto que una vez se planteen los problemas inversos multiescala, se utilizará una notación genérica, que no haga alusión a la notación de un contexto específico (como la que se suele usar en los contextos hidrodinámicos y de transporte). En otras palabras, una vez definidos los problemas, se estudiarán e implementarán en abstracto. En el Apéndice C se da una idea sobre cómo la resolución del problema abstracto se puede traducir en los problemas hidrodinámicos y de transporte.

Objetivos

Objetivo general

Proponer y estudiar problemas inversos multiescala para estimar los parámetros del subsuelo de interés, y a partir de este estudio, proponer una manera de resolver los problemas.

Objetivos específicos

1. Estudiar unicidad, estabilidad y errores de estimación de las soluciones de los problemas propuestos.
2. Realizar un análisis numérico de las soluciones.
3. Diseñar un algoritmo para resolver numéricamente el problema propuesto.
4. Validar el algoritmo propuesto mediante experimentos numéricos.

Resultados obtenidos

1. Aplicación de teoremas de unicidad, estabilidad y errores de estimación para un problema inverso parabólico multiescala mediante homogeneización.
2. Teoremas de convergencia para un modelo discretizado del problema inverso parabólico multiescala mediante Método de Elementos Finitos Heterogéneos Multiescala (*FE-HMM*¹) para las variables espaciales y Métodos de Runge-Kutta para la variable temporal.
3. Diseño de un algoritmo que, en base a los resultados anteriores, asegura convergencia hacia la solución del problema inverso parabólico multiescala.
4. Discusión sobre los experimentos numéricos para validar el método propuesto.
5. Propuesta sobre la aplicación de los resultados para ser utilizados en los problemas hidrodinámicos y de transporte.

Organización de la tesis

El Capítulo 1 está dividido en dos partes. La primera consiste en una introducción a los modelos hidrodinámico y de transporte, a partir de los cuales se van a definir los problemas inversos. La segunda parte del capítulo introduce brevemente elementos generales de la teoría de homogeneización, tanto en sus aspectos teóricos como en un método numérico propuesto para abordar problemas multiescala. Estos elementos son de utilidad en los Capítulos 2 y 3.

El Capítulo 2 corresponde a un estudio de un problema inverso elíptico, motivado por el modelo de Darcy estacionario asociado al problema hidrodinámico en su versión estacionaria. Este estudio se divide en tres partes: la primera corresponde a un análisis teórico del problema inverso multiescala y su homogeneización, y una propuesta para su resolución teórica. La segunda parte corresponde a un análisis numérico del problema inverso y una propuesta para su resolución numérica. La tercera parte corresponde a experimentos numéricos para validar el método propuesto. Cabe mencionar que este capítulo no es un aporte de la tesis, ya que

¹Por sus siglas en inglés, *Finite Element Heterogeneous Multiscale Method*.

corresponde a una revisión del trabajo hecho por Abdulle y Di Blasio [4], aunque la tercera parte se puede considerar una reproducción experimental de lo planteado por estos autores. El motivo por el que se incluyó esta revisión en la tesis es porque, en primer lugar, se puede aplicar para la resolución del modelo de Darcy estacionario, por lo que es de utilidad conocerlo a fondo. En segundo lugar, el enfoque realizado por Abdulle y Di Blasio es la motivación para el estudio realizado en el Capítulo 3, que es donde se encuentra el aporte de esta tesis.

El Capítulo 3 corresponde a un estudio de un problema inverso parabólico, motivado por el modelo de Darcy transiente asociado al problema hidrodinámico en su versión transiente, y por el modelo de convección-difusión asociado al problema de transporte. Este capítulo también se divide en tres secciones, análogas a las del Capítulo 2: la primera correspondiente a un análisis teórico del problema inverso multiescala y su homogeneización, y una propuesta para su resolución teórica. La segunda parte corresponde a un análisis numérico del mismo problema y una propuesta para su resolución numérica. La tercera parte corresponde a experimentos numéricos para validar el método propuesto.

A continuación, se presentan las conclusiones de la tesis, se discute su aporte y posibles trabajos a futuro que puedan surgir a partir de ésta.

Finalmente, hay un Apéndice que cuenta con tres secciones. La primera consiste en una descripción del método de Newton-Gradiente Conjugado Inexacto (NGCI), propuesto para la resolución de los problemas inversos de los Capítulos 2 y 3. La segunda consiste en una revisión de un problema de controlabilidad aproximada y su resolución tanto teórica como numérica. Este problema es relevante para la resolución del problema inverso parabólico del Capítulo 3. En la tercera sección se da una idea sobre cómo se podrían aplicar los resultados de los Capítulos 2 y 3 para los problemas hidrodinámicos y de transporte.

Capítulo 1

Preliminares

1.1. Modelos

1.1.1. Modelo hidrodinámico

El primer fenómeno a estudiar en el proceso de LIS es el fenómeno hidrodinámico, esto es, estudiar el movimiento del agua en el subsuelo compuesto por medios porosos.

El fenómeno hidrodinámico se puede modelar mediante la ley de Darcy estacionaria sobre un volumen Ω , que puede escribirse como el siguiente problema elíptico directo: Encontrar la carga hidráulica $h = h(x)[m]$ que satisface

$$\begin{cases} -div(K\nabla h) = Q \text{ en } \Omega \\ h = 0 \text{ sobre } \partial\Omega, \end{cases}$$

donde $Q = Q(x)$ es el término fuente, que corresponde a la densidad del caudal desde el exterior y $K = K(x)[\frac{m}{s}]$ es el tensor de conductividad hidráulica.

En algunos casos, es necesario modelar el fenómeno hidrodinámico mediante la ley de Darcy transiente, esto es, cuando la carga hidráulica h depende del tiempo. La ley de Darcy, entonces, se plantea como el siguiente problema parabólico directo para un volumen Ω y un tiempo $T > 0$: Encontrar la carga hidráulica $h = h(t, x)[m]$ que satisface

$$\begin{cases} S_s \partial_t h - div(K\nabla h) = Q \text{ en } (0, T) \times \Omega \\ h = 0 \text{ sobre } (0, T) \times \partial\Omega \\ h(t = 0) = h_0 \text{ en } \Omega, \end{cases}$$

donde $Q = Q(t, x)[\frac{1}{s}]$ es el término fuente, que corresponde a la densidad del caudal desde el exterior, ahora también dependiente del tiempo, $S_s = S_s(x)[\frac{1}{m}]$ es el almacenamiento específico y $h_0 = h_0(x)[m]$ la carga hidráulica inicial.

En este trabajo, se considera desconocido el parámetro de conductividad hidráulica K , y el objetivo es estimarlo a partir de mediciones sobre una parte del dominio (espacial y, cuando corresponda, temporal). Estas mediciones se especifican en abstracto en el Capítulo 2 para el caso estacionario, y en el en el Capítulo 3 para el caso transiente. En el Anexo C se dan ejemplos de formas más concretas para obtener estas mediciones.

Así, el fenómeno hidrodinámico define dos problemas inversos: uno para el caso estacionario, y otro para el transiente.

1.1.2. Modelo de transporte

El segundo fenómeno a estudiar en el proceso de LIS es el fenómeno de transporte. Este modelo estudia el movimiento de solutos en una solución acuosa sobre un dominio. Los fenómenos de transporte a considerar son advección y dispersión de los solutos.

Advección de los solutos: Movimiento de los solutos sobre un fluido siguiendo las líneas de corriente del mismo. Esta parte es controlada por la velocidad del medio, en este caso la velocidad de Darcy del fluido: $\vec{V} = K\nabla h$ del modelo hidrodinámico.

Dispersión de los solutos: Fenómeno que describe el movimiento de las partículas de soluto entre sí. Es una combinación de fenómenos tales como la difusión molecular y fenómenos de mezcla generados por la estructura porosa de la matriz rocosa. Esta parte está controlada por un coeficiente (escalar o tensorial) de difusión D .

Si se considera un fluido incompresible, como el agua, el fenómeno descrito se puede modelar mediante el siguiente problema parabólico sobre un dominio Ω y un tiempo $T > 0$: Encontrar la concentración de solutos $c = c(t, x)[\frac{g}{L}]$ que satisface

$$\begin{cases} \partial_t c - \text{div}(D\nabla c) + \vec{V} \cdot \nabla c = R \text{ en } (0, T) \times \Omega \\ c = 0 \text{ sobre } \partial\Omega \\ c(t = 0) = c_0 \text{ en } \Omega, \end{cases}$$

donde $D = D(x)[\frac{m^2}{s}]$ es la difusión, $\vec{V} = \vec{V}(x)[\frac{m}{s}]$ es el campo de velocidades, $R = R(t, x)[\frac{g}{sm^3}]$ es el término fuente que corresponde a la producción de soluto (positiva o negativa) a causa de las reacciones químicas, o bien a aportes externos, como pozos y $c_0 = c_0(x)[\frac{g}{L}]$ es la concentración inicial del soluto.

En este trabajo, se considera desconocido el parámetro de difusión D , y el objetivo es estimarlo a partir de ciertas mediciones sobre parte del dominio (espacial y temporal), a partir de las cuales se plantea el problema inverso. Al igual que para el modelo hidrodinámico transiente, estas mediciones se especifican en abstracto en el Capítulo 3, y en el contexto particular del modelo de transporte, en el Anexo C.

Así, el fenómeno de transporte define otro problema inverso, similar, desde un punto de vista matemático, al definido por el fenómeno hidrodinámico transiente, ya que en ambos casos se agrega la variable temporal. En el modelo de transporte, además, se agrega otro término de primer orden para la incógnita, $\vec{V} \cdot \nabla c$. Se verá, sin embargo, que este término no interfiere en el análisis y resolución del problema inverso.

Cabe destacar que tanto para los problemas hidrodinámicos y de transporte, se consideran medios anisotrópicos, esto es, que las propiedades del medio (la conductividad hidráulica y la difusión) cambian en distintas direcciones. Con esta consideración, los parámetros a estimar son tensores, y no escalares.

1.2. Elementos de Teoría de Homogeneización: Aspectos teóricos y numéricos

En adelante, se trabajarán los problemas inversos descritos utilizando la notación para EDPs genéricas, esto es: u denota las soluciones de las ecuaciones, $A = (a_{ij})_{i,j=1}^d$ el tensor asociado al término elíptico de la ecuación y f el término fuente. Se considera además el siguiente espacio para los tensores.

Definición 1.1 Sean $0 < \alpha < \beta$, se define la familia de tensores:

$$\mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega) := \left\{ A \in L^\infty(\Omega, Sym_d) \mid \begin{array}{l} \alpha|\xi|^2 \leq A(x)\xi \cdot \xi \leq \beta|\xi|^2 \\ \forall \xi \in \mathbb{R}^d \text{ y } x \in \Omega \text{ c.t.p.} \end{array} \right\}$$

Para todos los problemas inversos, se considerarán las siguientes hipótesis sobre los tensores.

Hipótesis 1.2 (*Hipótesis sobre los tensores*):

1. Para una familia de tensores $(A_s)_{s \in [\alpha, \beta]} \subset \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$, se conoce el mapeo $(s, x) \mapsto A_s(x)$, para todo $x \in \Omega$.
2. El tensor a estimar es de la forma $A_\sigma \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$, donde $A_\sigma := A_{\sigma(x)}$ para todo $x \in \Omega$, donde $\sigma : \Omega \rightarrow [\alpha, \beta]$ es una función desconocida.

Con estas hipótesis, encontrar el tensor A_σ se reduce a encontrar la función σ .

Las ecuaciones se definen en medios altamente oscilatorios en pequeñas escalas en comparación a la escala del dominio Ω . Estas pequeñas escalas están dadas por un cierto $\varepsilon > 0$ pequeño.

Notación 1.3 Se utilizará el superíndice ε en el contexto multiescala, tanto para los tensores como para las soluciones del problema directo. Así, los tensores y soluciones del problema directo multiescala se denotarán A^ε y u^ε respectivamente. Si además estos tensores están dados por una función escalar σ , se denotarán los tensores y las soluciones del problema directo asociadas como A_σ^ε y u_σ^ε respectivamente.

Así, los problemas se definirán en dos escalas:

1. **Escala macroscópica:** Definida por el dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, donde $d = 2$ ó 3 . La variable macroscópica asociada es denotada por $x \in \Omega$.

2. **Escala microscópica:** Dada por ε . Se asume una estructura periódica, de manera que baste trabajar en la llamada celda de referencia, denotada por Y . La variable microscópica asociada se denota $y \in Y$, donde se satisface la relación $y = x/\varepsilon$. Sin pérdida de generalidad, se puede suponer $Y = (0, 1)^d$ para el análisis.

Homogeneización

Resolver numéricamente el problema multiescala mediante un método de elementos finitos tradicional es inconveniente por al menos dos motivos: En primer lugar, las escalas microscópicas requerirían un refinamiento de la malla demasiado fina, lo que sería muy costoso computacionalmente, al punto de ser prohibitivo en muchos casos. En segundo lugar, no es de interés, pues para efectos de los problemas inversos definidos anteriormente, es suficiente con conocer el efecto a nivel macroscópico.

Con esto en mente, será preferible transformar el problema multiescala en uno que sólo considere la variable macroscópica. Para ello, se utilizará *homogeneización*. Esto es, considerar el efecto promedio (y no puntual) que las estructuras microscópicas causan a nivel macroscópico. Así, si $A^\varepsilon = A^\varepsilon(x, y)$ es un parámetro multiescala, al homogeneizarlo se obtiene un parámetro $A^0 = A^0(x)$ que incluye el efecto promedio de la variable microscópica y en Y . Bajo ciertas condiciones, el parámetro A^0 tiene una manera explícita de calcularse. El proceso de homogeneización se relaciona con la llamada G -convergencia, que es una noción de convergencia que varía de acuerdo a la ecuación en cuestión, por lo que se detalla en qué consiste esta noción en los Capítulos 2 y 3 para los problemas inversos elípticos y parabólicos respectivamente.

Homogeneización numérica mediante FE-HMM

Para la homogeneización numérica, se utilizará el Método de Elementos Finitos Heterogéneos Multiescala (FE-HMM por sus siglas en inglés. Para más detalles, ver [1, 2]), que consiste en definir dos espacios de elementos finitos para las variables espaciales, una para cada escala. Para la escala macroscópica, se definen los espacios de elementos finitos de diámetro H :

$$S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H) := \{v^H \in H_0^1(\Omega) : v^H|_K \in \mathcal{P}^l(K), \forall K \in \mathcal{T}_H\}, \quad (1.1)$$

donde \mathcal{T}_H es una partición de Ω en elementos K de diámetro H_K . Para cada elemento $K \in \mathcal{T}_H$, se define una fórmula de cuadratura $\{x_{K_j}, w_{K_j}\}_{j=1}^J$, que es exacta para polinomios en $\mathcal{P}^l(K)$.

Una elección adecuada de las fórmulas de cuadratura deben asegurar la coercitividad de la forma bilineal que define la formulación variacional de los problemas directos. Se considera el elemento de referencia \hat{K} y el mapeo (\mathcal{C}^1 -difeomorfismo) F_K tal que $K = F_K(\hat{K})$, para cada K , elemento de la triangulación. Para cada K se considera la fórmula de cuadratura $\{x_{K_j}, w_{K_j}\}_{j=1}^J$ de manera que los pesos de cuadratura y puntos de integración están dados por $x_{K_j} = F_K(\hat{x}_j)$, $w_{K_j} = \hat{w}_j |\det(\partial F_K)|$, donde $\{\hat{x}_j, \hat{w}_j\}_{j=1}^J$ es la fórmula de cuadratura en \hat{K} . Para ello, se considera la siguiente hipótesis:

Hipótesis 1.4 (*Condiciones para la fórmula de cuadratura*)

$$\hat{w}_j > 0, \forall j = 1, \dots, J, \sum_{j=1}^J \hat{w}_j |\nabla \hat{p}(\hat{x}_j)|^2 \geq \hat{\lambda} \|\nabla \hat{p}\|_{L^2(\hat{K})}^2, \forall \hat{p}(\hat{x}) \in \mathcal{P}^l(\hat{K}), \text{ con } \hat{\lambda} > 0. \quad (1.2)$$

$$\int_{\hat{K}} \hat{p}(\hat{x}) d\hat{x} = \sum_{j=1}^J \hat{w}_j \hat{p}(\hat{x}_j), \forall \hat{p}(\hat{x}) \in \mathcal{P}^\sigma(\hat{K}), \quad (1.3)$$

donde $\sigma = \max\{2l - 2, l\}$ si \hat{K} es un elemento simplicial, o $\sigma = \max\{2l - 1, l + 1\}$ si \hat{K} es un elemento rectangular.

Para cada elemento macroscópico, se necesita una aproximación del tensor homogeneizado en cada punto de integración. Dicha aproximación se obtiene resolviendo un problema microscópico definido en los dominios de prueba $K_{\delta_j} = x_{K_j} + (-\delta/2, \delta/2)^d$, para $\delta \geq \varepsilon$. Para estos dominios, se define el espacio de elementos finitos microscópicos:

$$S^q(K_{\delta_j}, \mathcal{T}_h) = \{z^h \in W(K_{\delta_j}) : z^h|_T \in \mathcal{P}^q(T), \forall T \in \mathcal{T}_h\}, \quad (1.4)$$

donde \mathcal{T}_h es una partición de K_{δ_j} , y además

$$W(K_{\delta_j}) = W_{per}^1 = \{z \in H_{per}^1(K_{\delta_j}) : \int_{K_{\delta_j}} z = 0\} \quad (1.5)$$

en caso de acoplamiento periódico y

$$W(K_{\delta_j}) = H_0^1(K_{\delta_j}) \quad (1.6)$$

para acoplamiento con condiciones de borde Dirichlet.

Capítulo 2

Problema inverso elíptico

Este capítulo consiste principalmente en una revisión del trabajo de Abdulle y Di Blasio en [4]. Se expondrá gran parte de ese trabajo por dos motivos: en primer lugar, se aplicarán los resultados para el problema que motivó esta tesis. En segundo lugar, el trabajo se utilizará como inspiración para el problema inverso parabólico en el Capítulo 3, que, al menos bajo los conocimientos del autor de la presente tesis, no se ha hecho con el mismo enfoque. En la última sección de este capítulo, se realizan experimentos numéricos similares, aunque no iguales, a los realizados por Abdulle y Di Blasio.

2.1. Análisis

2.1.1. Homogeneización del problema

Se considera el problema elíptico multiescala de encontrar soluciones débiles $u^\varepsilon \in H^1(\Omega)$ que satisfacen

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon) = f & \text{en } \Omega \\ u^\varepsilon = 0 & \text{sobre } \partial\Omega, \end{cases} \quad (2.1)$$

donde $f \in H^{-1}(\Omega)$. Para $0 < \alpha < \beta$, se considera la familia de tensores $\mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ definida en (1.1). La familia de tensores $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0} \subset \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ satisface la Hipótesis 1.2, por lo que se denotará como A_s^ε a un tensor dado por un escalar s . Además, se supone que la estructura del tensor es Y -periódica en la variable microscópica $y = x/\varepsilon$, donde Y es la celda de la escala microscópica, que sin pérdida de generalidad, se puede suponer $Y = (0, 1)^d$. El problema inverso consiste en determinar el tensor A_σ^ε a partir de mediciones de los flujos $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega}$ sobre el borde $\partial\Omega$, donde u_σ^ε denota la solución del problema (2.1) asociado al tensor $A^\varepsilon = A_\sigma^\varepsilon$. La unicidad y estabilidad en el borde fueron probadas por G. Alessandrini y R. Gaburro [6], bajo algunos supuestos de regularidad sobre el mapeo $(s, x) \mapsto A(s, x)$. Si bien este resultado sigue siendo válido para tensores altamente oscilatorios, las estimaciones de estabilidad dependerán de una constante de orden $\mathcal{O}(\varepsilon^{-1})$. Con esto, técnicas numéricas clásicas como Método de Elementos Finitos (MEF) para calcular numéricamente el

problema inverso necesitan resolverse en mallas demasiado finas, de manera que se resuelvan en las escalas microscópicas dadas por ε , lo que representa a menudo un costo computacional demasiado alto, al punto de ser prohibitivas. En [4], Abdulle y Di Blasio propusieron un método numérico que combina el problema inverso con una reformulación homogeneizada del mismo, de manera que se trabaje sólo en la escala macroscópica, y que los efectos de la escala microscópica se consideren en su efecto promedio. La teoría de homogeneización (ver, por ejemplo, [11, 27]) asegura que la solución u^ε del problema (2.1) converge en un sentido de G -convergencia (ver Definición 2.1) a cierto $u^0 \in H^1(\Omega)$, que es solución del problema homogeneizado

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A^0 \nabla u^0) = f \text{ en } \Omega \\ u^0 = 0 \text{ sobre } \partial\Omega. \end{cases} \quad (2.2)$$

Definición 2.1 (*G-convergencia, contexto elíptico*): Sea $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0} \subset \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$. Sea además $A^0 \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$. Para cada $\varepsilon > 0$, sea $u^\varepsilon \in H_0^1(\Omega)$ la solución del problema elíptico (2.1). Sea además $u^0 \in H_0^1(\Omega)$ la solución del problema elíptico (2.2). Se dice que A^ε G -converge a $A^0 \in \mathcal{M}(\alpha', \beta', \Omega)$ si para todo $f \in H^{-1}(\Omega)$, las soluciones u^ε satisfacen:

$$\begin{aligned} u^\varepsilon &\rightharpoonup u^0 \text{ en } H_0^1(\Omega) \\ A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon &\rightharpoonup A^0 \nabla u^0 \text{ en } (L^2(\Omega))^d \end{aligned}$$

cuando $\varepsilon \rightarrow 0$.

Bajo ciertas condiciones, se puede probar que el tensor A^ε G -converge al tensor homogeneizado A^0 . Así, para valores de ε suficientemente pequeños, resolver el problema inverso multiescala asociado a la ecuación (2.1) se puede traducir, de manera aproximada, en resolver el problema inverso homogeneizado asociado a la ecuación (2.2), sólo en la variable macroscópica $x \in \Omega$.

Se tiene el siguiente resultado de compacidad. Para su demostración, ver, por ejemplo, [27] (Teorema 5.7).

Teorema 2.2 Sea $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ una sucesión de matrices en $\mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$. Entonces existe una subsucesión $(A^{\varepsilon'})_{\varepsilon'>0}$ y una matriz $A^0 \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ tales que $G \lim_{\varepsilon' \rightarrow 0} A^{\varepsilon'} = A^0$.

En particular, se consideran matrices $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0} \subset \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ de la forma $A^\varepsilon(x) = A(x, x/\varepsilon) =: A(x, y)$, Y -periódicas en la variable $y \in Y$. También se utilizará la notación $A^\varepsilon(x) = (a_{ij}^\varepsilon(x))_{i,j=1}^d$, donde $a_{ij}^\varepsilon(x) = a_{ij}(x, x/\varepsilon) =: a_{ij}(x, y)$ es Y -periódica en y , para todo $i, j = 1, \dots, d$.

En este caso particular, se tiene que la sucesión completa $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ G -converge al tensor $A^0 \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$, con $A^0(x) = \{a_{ij}^0\}_{i,j=1}^d$. Este tensor es elíptico y está dado por

$$a_{ij}^0(x) = \frac{1}{|Y|} \int_Y a_{ij}(x, y) dy - \frac{1}{|Y|} \sum_{k=1}^d \int_Y a_{ij}(x, y) \frac{\partial \hat{\chi}_j}{\partial y_k} dy, \quad \forall i, j = 1, \dots, d, \quad (2.3)$$

donde $|Y|$ denota la medida de Lebesgue de Y . Las funciones microscópicas $\hat{\chi}_j$, $j = 1, \dots, d$, son las únicas soluciones del problema celda: encontrar $\hat{\chi}_j \in W_{per}^1(Y)$ tal que

$$\int_Y A(x, y) \nabla_y \hat{\chi}_j \cdot \nabla_y v dy = \int_Y A(x, y) \mathbf{e}_j \cdot \nabla_y v dy, \quad \forall v \in W_{per}^1(Y), \quad (2.4)$$

donde $(\mathbf{e}_j)_{j=1}^d$ es la base canónica de \mathbb{R}^d y

$$W_{per}^1(Y) := \{v \in H_{per}^1(Y) : \int_Y v dy = 0\},$$

donde $H_{per}^1(Y)$ es la cerradura de $\mathcal{C}_{per}^\infty(Y)$ (es decir, las funciones en $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d)$ periódicas en Y) con respecto a la norma $\|\cdot\|_{H^1(Y)}$.

En [4], el problema a considerar es levemente distinto al problema (2.1), ya que se considera el término fuente $f = 0$, pero en vez, se considera una condición de borde $g \in H^{1/2}(\partial\Omega)$. Sin embargo, es fácil verificar que la formulación de ambos problemas son equivalentes. En ese artículo, la resolución del problema inverso se hace mediante la recuperación del operador Dirichlet-Neumann asociado a un tensor A , definido como $\Lambda_A : H^{1/2}(\partial\Omega) \rightarrow H^{-1/2}(\partial\Omega)$, donde

$$\Lambda_A g = A \nabla u \cdot \nu|_{\partial\Omega},$$

donde u es solución del problema elíptico asociado al tensor A y a la condición de borde g . En esta tesis, el operador Dirichlet-Neumann asociado al problema (2.1), se define como $\Lambda_A : H^{-1}(\Omega) \rightarrow H^{-1/2}(\partial\Omega)$, dado por

$$\Lambda_A f = A \nabla u \cdot \nu|_{\partial\Omega},$$

donde u es solución del problema elíptico asociado al tensor A y al término fuente f .

El modelo que se utiliza para resolver el problema inverso es el homogeneizado, y por lo tanto se deben estudiar las condiciones sobre A^ε bajo las cuales el mapeo $s \mapsto A_s^0$ satisface las propiedades de regularidad para asegurar estabilidad y unicidad del problema inverso. Se tiene el siguiente resultado:

Corolario 2.3 (Corolario 3.3 en [4]) Sea $E > 0$ y $p > d$. Sean $s \mapsto A_s$ funciones matriciales de $d \times d$ simétricas, para $s \in [\alpha, \beta]$, $0 < \alpha < \beta$, que satisfacen:

$$|\partial_s A_s| + |\partial_{ss}^2 A_s| \leq E, \quad \forall s \in [\alpha, \beta] \quad (2.5)$$

$$\alpha |\xi|^2 \leq A_s \xi \cdot \xi \leq \beta |\xi|^2, \quad \forall s \in [\alpha, \beta], \forall \xi \in \mathbb{R}^d \quad (2.6)$$

$$\partial_s A_s \xi \cdot \xi \geq E^{-1} |\xi|^2, \quad \forall s \in [\alpha, \beta], \forall \xi \in \mathbb{R}^d \quad (2.7)$$

Sean $\sigma_1, \sigma_2 \in W^{1,p}(\Omega)$ que satisfacen

$$\begin{aligned} \alpha &\leq \sigma_1(x), \sigma_2(x) \leq \beta, \forall x \in \Omega \\ \|\sigma_1\|_{W^{1,p}(\Omega)}, \|\sigma_2\|_{W^{1,p}(\Omega)} &\leq E \end{aligned}$$

Luego,

1. Se tiene la siguiente estimación:

$$\|A_{\sigma_1} - A_{\sigma_2}\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C \|\Lambda_{A_{\sigma_1}} - \Lambda_{A_{\sigma_2}}\|_{\mathcal{L}(H^{-1}(\Omega), H^{-1/2}(\partial\Omega))},$$

donde C depende de α, β, E, p y Ω . Además, u_{σ_i} es la solución del problema elíptico asociado a A_{σ_i} , para $i = 1, 2$.

2. Si $p = \infty$ y además Ω es un polígono que se puede particionar en una cantidad finita de dominios Lipschitz $\{\Omega_j\}_{j=1}^N$ tales que $\sigma_1 - \sigma_2$ es analítica en cada $\overline{\Omega}_j$, y además

$$\Lambda_{A_{\sigma_1}} = \Lambda_{A_{\sigma_2}},$$

entonces

$$A_{\sigma_1} = A_{\sigma_2} \text{ en } \Omega.$$

En adelante, se trabajará directamente con los flujos, esto es, se trabajará con las evaluaciones del operador Dirichlet-Neumann sobre cada f , por lo que se trabajará explícitamente con los flujos escritos de la forma $A\nabla u \cdot \nu$, en lugar de escribir en términos del operador Λ_A . Dicho de otro modo, se trabajará con el operador de manera puntual, no uniforme.

El siguiente teorema establece que, bajo ciertas condiciones de un tensor multiescala, el tensor homogeneizado respectivo dado por (2.3) satisface las condiciones (2.5)-(2.7). Esto garantiza estabilidad y unicidad para el problema inverso asociado al tensor homogeneizado A^0 .

Teorema 2.4 (Teorema 3.5 en [4]) Sean $x/\varepsilon = y \in Y$, $F > d$ y $p > d$. Se consideran también funciones matriciales $(s, y) \mapsto A(s, y)$, donde a_{ij} es Y -periódica $\forall i, j = 1, \dots, d$, $s \in [\alpha, \beta]$, $0 < \alpha < \beta$ y tales que:

$$\begin{aligned} A &\in W^{1,\infty}([\alpha, \beta] \times Y, \text{Sym}_d), & \|A\|_{W^{1,\infty}([\alpha, \beta]; W^{1,\infty}(Y))} &\leq F \\ \partial_s A &\in W^{1,\infty}([\alpha, \beta] \times Y, \text{Sym}_d), & \|\partial_s A\|_{W^{1,\infty}([\alpha, \beta]; W^{1,\infty}(Y))} &\leq F \\ \alpha|\xi|^2 &\leq A(s, y)\xi \cdot \xi \leq \beta|\xi|^2, & \text{c.t.p. } y \in Y, \forall s \in [\alpha, \beta], \xi \in \mathbb{R}^d & \\ \partial_s A(s, y)\xi \cdot \xi &\geq F^{-1}|\xi|^2, & \text{c.t.p. } y \in Y, \forall s \in [\alpha, \beta], \xi \in \mathbb{R}^d, & \end{aligned}$$

entonces el tensor homogeneizado A^0 satisface (2.5)-(2.7).

Con esto, se tiene que para recuperar el tensor homogeneizado A_σ^0 basta recuperar el flujo $A_\sigma^0 \nabla u_\sigma^0 \cdot \nu|_{\partial\Omega}$, donde u_σ^0 es la solución de (2.2) con $A^0 = A_\sigma^0$. Sin embargo, éste no es precisamente el caso de interés, ya que se busca resolver el problema inverso a partir de los flujos asociados al tensor multiescala $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega}$, donde u_σ^ε es la solución de (2.1) con $A^\varepsilon = A_\sigma^\varepsilon$.

Las propiedades del escalar σ del Corolario 2.3 motivan a definir lo siguiente: Dados $\alpha, \beta, E > 0$, con $\alpha < \beta$, se define el conjunto de parámetros admisibles \mathcal{A} como

$$\mathcal{A} := \{m \in W^{1,\infty}(\Omega) : \alpha \leq m(x) \leq \beta, 0 < \alpha < \beta \text{ y } \|m\|_{W^{1,\infty}(\Omega)} \leq E\}. \quad (2.8)$$

El Corolario 2.3 motiva a definir el siguiente problema de minimización:

$$\begin{aligned} \min_{m \in \mathcal{A}} & \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu\|_{H^{-1/2}(\partial\Omega)}^2 \\ \text{sujeto a } & \begin{cases} -\text{div}(A_m^0 \nabla u_m^0) = f \text{ en } \Omega \\ u_m^0 = 0 \text{ sobre } \partial\Omega. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Cabe recalcar que la G -convergencia de A_σ^ε a A_σ^0 no implica la convergencia de los flujos correspondientes. Sin embargo, se puede verificar que, como A_σ^ε G -converge a A_σ^0 , el flujo correspondiente converge débilmente, como se ve en el siguiente lema.

Lema 2.5 *Sea una sucesión de tensores $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0} \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$. Luego, $(A^\varepsilon)_\varepsilon$ G -converge a $A^0 \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ si y sólo si para todo $f \in H^{-1}(\Omega)$, $A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega}$ converge débil* a $A^0 \nabla u^0 \cdot \nu|_{\partial\Omega}$ en $H^{-1/2}(\partial\Omega)$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, donde u^ε y u^0 son las soluciones de (2.1) y (2.2) respectivamente.*

Demostración: De la definición de G -convergencia, se tiene que para todo $\psi \in H^1(\Omega)$,

$$\int_{\Omega} (A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon - A^0 \nabla u^0) \cdot \nabla \psi \rightarrow 0 \text{ cuando } \varepsilon \rightarrow 0.$$

Luego, integrando por partes, se obtiene

$$(A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon \cdot \nu - A^0 \nabla u^0 \cdot \nu, \psi)_{H^{-1/2}(\partial\Omega), H^{1/2}(\partial\Omega)} \rightarrow 0 \text{ cuando } \varepsilon \rightarrow 0.$$

Esto prueba la convergencia débil* de los flujos asociados. La recíproca se demuestra siguiendo los mismos pasos a la inversa. \square

El siguiente teorema establece que la G -convergencia entre dos tensores garantiza que el G -límite se alcanza resolviendo el problema de minimización propuesto en (2.9).

Teorema 2.6 *(Teorema 3.7 en [4]) Sea $(A_\sigma^\varepsilon) \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$, donde $\sigma \in \mathcal{A}$ tal que A_σ^ε G -converge a $A_\sigma^0 \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$. Para $\varepsilon > 0$ fijo, se considera el problema de minimización*

$$\min_{m \in \mathcal{A}} \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu\|_{H^{-1/2}(\partial\Omega)}^2.$$

Entonces, para cada $\varepsilon > 0$, cualquier sucesión minimizante $(m_n^\varepsilon)_{n \geq 0}$ tiene una subsucesión $(m_{n_k}^\varepsilon)_{k \geq 0}$ tal que

$$G \lim_{k \rightarrow \infty} A_{m_{n_k}^\varepsilon}^0 = A_\sigma^\varepsilon.$$

Además,

$$G \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (G \lim_{k \rightarrow \infty} A_{m_{n_k}^\varepsilon}^0) = A_\sigma^0$$

Demostración: Se denotará

$$\Phi(m) := \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu\|_{H^{-1/2}(\partial\Omega)}^2, \quad \inf_{m \in \mathcal{A}} \Phi(m) = \bar{\Phi}.$$

Como $(m_n^\varepsilon)_{n \geq 0}$ es minimizador y Φ es no-negativo, sigue que la sucesión $\Phi(m_n^\varepsilon)_{n \geq 0}$ es uniformemente acotada, es decir, para cualquier $\delta > 0$, existe $M = M(\delta)$ tal que

$$0 \leq \Phi(m_n^\varepsilon) \leq \bar{\Phi} + \delta, \forall n \geq M.$$

Luego, existe una subsucesión $(m_{n_k}^\varepsilon)_{k \geq 0}$ tal que

$$A_{m_{n_k}^\varepsilon}^0 \nabla u_{m_{n_k}^\varepsilon}^0 \cdot \nu|_{\partial\Omega} \rightharpoonup A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega} \text{ débil* en } H^{-1/2}(\partial\Omega).$$

Por el Lema 2.5, esto implica que $A_{m_{n_k}^\varepsilon}^0$ G -converge a A_σ^0 cuando $k \rightarrow \infty$, esto es,

$$G \lim_{k \rightarrow \infty} A_{m_{n_k}^\varepsilon}^0 = A_\sigma^0$$

Finalmente, como A_σ^ε G -converge a A_σ^0 cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, se tiene también que

$$G \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (G \lim_{k \rightarrow \infty} A_{m_{n_k}}^\varepsilon) = G \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} A_\sigma^\varepsilon = A_\sigma^0. \quad \square$$

Este resultado no implica la convergencia puntual a la solución del problema inverso, pero asegura que, utilizando la G -convergencia de los tensores multiescala al tensor homogeneizado, la solución del problema de minimización descrito es cercana (en un sentido de G -convergencia) a la solución del problema inverso multiescala, para $\varepsilon > 0$ suficientemente pequeño.

Para los experimentos numéricos se considerará la norma $L^2(\partial\Omega)$ para evaluar la distancia entre los datos (flujos multiescala $A_\sigma^\varepsilon \nabla u^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega}$) y los flujos obtenidos con el modelo homogeneizado $A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu|_{\partial\Omega}$, dada la dificultad numérica de trabajar con espacios de Sobolev fraccionarios. Es decir, se considerará el problema

$$\min_{m \in \mathcal{A}} \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu\|_{L^2(\partial\Omega)}^2.$$

Para que esto tenga sentido (es decir, los flujos pertenezcan a $L^2(\partial\Omega)$), las soluciones deben ser suficientemente suaves. Más específicamente, $u_\sigma^\varepsilon, u_m^0 \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. Sea $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ dado por

$$\Phi(m) := \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu\|_{L^2(\partial\Omega)}^2.$$

Se considera el problema de minimización

$$\bar{\Phi} := \inf_{m \in \mathcal{A}} \Phi(m). \quad (2.10)$$

Como \mathcal{A} es un convexo, cerrado, no vacío en $W^{1,\infty}(\Omega)$, se puede probar que cualquier sucesión minimizante $(m_n)_n$ de (2.10) contiene una subsucesión que converge débilmente a cierto $\bar{m} \in \mathcal{A}$, con lo que $\bar{\Phi} = \Phi(\bar{m})$, tal como se establece en el siguiente lema:

Lema 2.7 (Lema 4.1 en [4]) Sea A_m^0 tal que se satisfacen (2.5)-(2.6), $\forall m \in \mathcal{A}$. Sea $(m_n)_n \subset \mathcal{A}$ una sucesión que converge a $m \in \mathcal{A}$ en $L^r(\Omega)$, para $r \geq 1$. Luego, la sucesión $(A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu|_{\partial\Omega})_n$ converge a $A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu|_{\partial\Omega}$ en $H^{-1/2}(\partial\Omega)$. Si las soluciones $u_m^0, u_{m_n}^0 \in H^2(\Omega)$, entonces la convergencia es en $L^2(\partial\Omega)$.

Para la demostración de este lema, es necesario considerar el teorema de Meyers de regularidad en problemas elípticos:

Teorema 2.8 (Meyers, [32]): Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un abierto, con borde Lipschitz. Sea $A \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$. Luego, existe una constante $q_1 = q_1(d, \Omega, \alpha, \beta) > 2$ tal que, si u es la única solución débil del problema elíptico

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A \nabla u) = f \text{ en } \Omega \\ u = g \text{ sobre } \partial\Omega, \end{cases} \quad (2.11)$$

y $f \in W^{-1,q'}(\Omega)$, $g \in W^{1/q,q'}(\partial\Omega)$, donde $1/q + 1/q' = 1$, $q \in [2, q_1)$, entonces $u \in W^{1,q}(\Omega)$ y existe una constante $C_1 = C_1(d, \Omega, \alpha, \beta, q)$, tal que

$$\|u\|_{W^{1,q}(\Omega)} \leq C_1 (\|\tilde{g}\|_{W^{1,q}(\Omega)} + \|f\|_{W^{-1,q'}(\Omega)}),$$

donde \tilde{g} denota la extensión de g en $W^{1,q}(\Omega)$.

Demostración del Lema 2.7: La demostración se hace para el caso general en el que la condición de borde es $g \in W^{1/q,q'}(\partial\Omega)$. De la formulación variacional del problema elíptico (2.11) asociado a m y los $(m_n)_n$, se tiene que

$$\int_{\Omega} (A_m^0 \nabla u_m^0 - A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0) \cdot \nabla v = 0, \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

Sumando el término $\int_{\Omega} A_{m_n}^0 \nabla u_m^0 \cdot \nabla v$, se obtiene

$$\int_{\Omega} A_{m_n}^0 (\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0) \cdot \nabla v = \int_{\Omega} (A_{m_n}^0 - A_m^0) \nabla u_m^0 \cdot \nabla v, \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

Eligiendo $v = u_m^0 - u_{m_n}^0 \in H_0^1(\Omega)$, y por desigualdad de Hölder, se tiene que

$$\begin{aligned} \|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(\Omega)} &\leq C_1 \|A_m^0 - A_{m_n}^0\|_{L^p(\Omega)} \left(\|\tilde{g}\|_{W^{1,q}(\Omega)} + \|f\|_{W^{-1,q'}(\Omega)} \right) \\ &\leq C_1 E \|m - m_n\|_{L^p(\Omega)} \left(\|\tilde{g}\|_{W^{1,q}(\Omega)} + \|f\|_{W^{-1,q'}(\Omega)} \right) \\ &\leq C_2 \|m - m_n\|_{L^p(\Omega)}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde $q \in [2, q_1)$ y C_1 vienen del Teorema 2.8, y p es tal que $1/p + 1/q = 1/2$. En la segunda línea de estas desigualdades se utilizó el Teorema del Valor Medio para los tensores A_m^0 y $A_{m_n}^0$ junto con 2.5. Luego, se define $w := A_m^0 \nabla u_m^0 - A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0$, y con esto,

$$\begin{aligned} \|w\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \int_{\Omega} |w|^2 = \int_{\Omega} A_{m_n}^0 (\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0) \cdot w + \int_{\Omega} (A_m^0 - A_{m_n}^0) \nabla u_m^0 \cdot w \\ &\leq \left(\|A_{m_n}^0\|_{L^\infty(\Omega)} \|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(\Omega)} + \|A_m^0 - A_{m_n}^0\|_{L^p(\Omega)} \|\nabla u_m^0\|_{L^q(\Omega)} \right) \|w\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Luego, utilizando la desigualdad (2.12),

$$\|A_m^0 \nabla u_m^0 - A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(\Omega)} \leq (E + \alpha) C_2 \|m - m_n\|_{L^p(\Omega)}. \quad (2.13)$$

Notar que $w \in H(\operatorname{div}; \Omega) = \{F \in (L^2(\Omega))^d : \operatorname{div}(F) \in L^2(\Omega)\}$, dotado de la norma

$$\|F\|_{H(\operatorname{div}; \Omega)} = \|F\|_{L^2(\Omega)} + \|\operatorname{div}(F)\|_{L^2(\Omega)}.$$

En efecto, $\operatorname{div}(w) = 0$. Utilizando la continuidad del mapeo $w \in H(\operatorname{div}; \Omega) \mapsto w \cdot \nu \in H^{-1/2}(\partial\Omega)$, y el hecho de que $\operatorname{div}(w) = 0$, se tiene que

$$\|w \cdot \nu\|_{H^{-1/2}(\Omega)} \leq \|w\|_{L^2(\Omega)}.$$

Usando la estimación (2.13), se concluye finalmente que

$$\|A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu - A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu\|_{H^{-1/2}(\partial\Omega)} \leq C \|m - m_n\|_{L^p(\Omega)}.$$

Si $r \geq p$, el resultado buscado es directo. Si no, se saca provecho del hecho de que \mathcal{A} es acotado en $L^\infty(\Omega)$ y así, para cada $m \in \mathcal{A}$, se tiene que

$$\int_{\Omega} |m|^p \leq \lambda^{r-p} \int_{\Omega} |m|^r.$$

Con todo esto, se obtiene la convergencia en $H^{-1/2}(\partial\Omega)$.

Si además las soluciones $u_m, u_{m_n} \in H^2(\Omega)$, entonces $f \in L^2(\Omega)$. Gracias a esto y a las suposiciones de regularidad del mapeo $s \mapsto A_s^0$, se tiene que la sucesión $(A_{m_n} \nabla u_{m_n}^0)_n$ es uniformemente acotada en $(H^1(\Omega))^d$. Luego, existe una subsucesión $(A_{m_{n'}} \nabla u_{m_{n'}}^0)_{n'}$ tal que

$$A_{m_{n'}}^0 \nabla u_{m_{n'}}^0 \rightharpoonup \xi \text{ débil en } (H^1(\Omega))^d,$$

para algún $\xi \in \mathbb{R}^d$. Luego,

$$A_{m_{n'}}^0 \nabla u_{m_{n'}}^0 \rightarrow \xi \text{ fuerte en } (L^2(\Omega))^d,$$

Pero de (2.13), todas las subsucesiones $A_{m_{n'}} \nabla u_{m_{n'}}^0$ deben converger al mismo límite. Así,

$$A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \rightharpoonup A_m^0 \nabla u_m^0 \text{ débil en } (H^1(\Omega))^d,$$

y por lo tanto,

$$A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu \rightharpoonup A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu \text{ débil en } H^{1/2}(\partial\Omega).$$

Finalmente, gracias a la inyección compacta $H^{1/2}(\partial\Omega) \subset L^2(\partial\Omega)$, se tiene que

$$A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu \rightarrow A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu \text{ fuerte en } L^2(\partial\Omega). \quad \square$$

2.1.2. Regularización de Tikhonov

En experimentos numéricos, se prefiere adoptar métodos indirectos para asegurar estabilidad del problema inverso, en lugar de directamente imponer restricciones en el proceso de minimización. El método que se elegirá es el de regularización de Tikhonov (ver, por ejemplo, [19]), que asegura buen colocamiento al agregar una penalización convexa a la función objetivo del problema de minimización. Así, el problema de minimización se formula como

$$\bar{\Psi} = \inf_{m \in \mathcal{A}} \Psi(m) := \Phi(m) + \gamma R(m), \quad (2.14)$$

donde γ es el parámetro de regularización y R el término de penalización. En adelante, se considerará el término $R(m) = \|m\|_{H^1(\Omega)}^2$. La elección del parámetro de regularización γ controla la relación entre los términos $\Phi(m)$ y $R(m)$, estableciendo qué tanto se permitirá que una sucesión minimizante oscile. Se han propuesto métodos para la elección de dicho parámetro, como el principio de discrepancia de Morozov [33, 35], o el método de la L-curva [25, 26]. No es el objetivo de este trabajo ahondar en los métodos para elegir un γ adecuado, por lo que bastará comparar numéricamente las soluciones para distintos valores de este parámetro. El siguiente teorema establece que el mínimo del problema (2.14) se alcanza en \mathcal{A} .

Teorema 2.9 (Teorema 4.2 en [4]) Sean $u^0 \in H^2(\Omega)$ y $(m_n)_n$ una sucesión minimizante de (2.14). Luego, la sucesión contiene una subsucesión que converge débilmente en $H^1(\Omega)$ a cierto $\bar{m} \in \mathcal{A}$, que alcanza el ínfimo, esto es, $\bar{\Psi} = \Psi(\bar{m})$.

Demostración: En el Teorema 2.6 ya se establece la continuidad débil de Φ . Por la no-negatividad de Φ y del hecho de que la sucesión $(m_n)_n$ es minimizante, sigue que la sucesión $(\gamma \|m_n\|_{H^1(\Omega)})^2$ es uniformemente acotada, esto es, para todo $\delta > 0$, existe $M = M(\delta)$ tal que

$$\gamma \|m_n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \bar{\Phi} + \delta, \forall n \geq M.$$

Luego, existe una subsucesión $(m_{n_k})_k$ que converge débilmente en $H^1(\Omega)$ a cierto $\bar{m} \in \mathcal{A}$. Como $u^0 \in H^2(\Omega)$, por el Lema 2.7, junto con la semicontinuidad inferior débil de R , se tiene entonces semicontinuidad inferior débil de Ψ . Luego,

$$\Psi(\bar{m}) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \Psi(m_n) \leq \bar{\Psi}.$$

Además, por definición, $\Psi(\bar{m}) \geq \bar{\Psi}$, por lo que se tiene la igualdad. \square

2.2. Análisis numérico

2.2.1. Discretización Espacial

Primero, se describirá un *solver* directo usado para aproximar el flujo homogeneizado en la frontera dado por el problema Se necesita un método eficiente para evaluar el flujo homogeneizado en la frontera, $A^0 \nabla u^0 \cdot \nu$. Sin embargo, dado A^ε , es usual que no se conozca el tensor homogeneizado correspondiente A^0 analíticamente, por lo que se recurrirá a la homogeneización numérica.

Para la discretización espacial, se considera el método FE-HMM, presentado en la Sección 1.2 para la homogeneización numérica del problema, incluyendo los dominios de prueba K_{δ_j} y las condiciones para la fórmula de cuadratura $\{x_{K_j}, w_{K_j}\}_{j=1}^J$ de la Hipótesis 1.4.

El método numérico para la resolución numérica del problema directo se define como sigue: encontrar $u^H \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H)$ tal que

$$B_H(u^H, v^H) = F_H(v^H), \forall v^H \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H)$$

donde

$$B_H(u^H, v^H) := \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \frac{w_{K_j}}{|K_{\delta_j}|} \int_{K_{\delta_j}} A^\varepsilon \nabla u_{K_j}^h \cdot \nabla v_{K_j}^h \quad (2.15)$$

y

$$F_H(v^H) = \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J w_{K_j} f(x_{K_j}) v^H(x_{K_j}).$$

Las funciones $u_{K_j}^h$ y $v_{K_j}^h$ son las soluciones del problema microscópico restringidas por $u_{lin,j}^H$ y $v_{lin,j}^H$, respectivamente. Esto es, encontrar $w_{K_j}^h$ tal que $(w_{K_j}^h - w_{lin}^H) \in S^q(K_{\delta_j}, \mathcal{T}_h)$ y

$$\int_{K_{\delta_j}} A^\varepsilon \nabla w_{K_j}^h \cdot \nabla z^h = 0, \forall z^h \in S^q(K_{\delta_j}, \mathcal{T}_h), \quad (2.16)$$

donde $w_{lin,j}^H := w^H(x_{K_j}) + (x - x_{K_j}) \cdot \nabla w^H(x_{K_j})$. El método numérico converge de acuerdo a las siguientes estimaciones (ver [1, 2]):

$$\begin{aligned} \|u^0 - u^{0,H}\|_{H^1(\Omega)} &\leq C \left(H^l + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + e_{MOD} \right) \\ \|u^0 - u^{0,H}\|_{L^2(\Omega)} &\leq C \left(H^{l+1} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + e_{MOD} \right), \end{aligned}$$

donde e_{MOD} captura un error de modelamiento de las soluciones (para más detalles, ver [2], Sección 5). Además, el tensor homogeneizado satisface

$$\sup_{\substack{K \in \mathcal{T}_H \\ x \in K}} \|A^{0,h}(x) - A^0(x)\|_F \leq C \left(H^l + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + e_{MOD} \right),$$

donde

$$(A^{0,h}(x))_{ik} = \int_Y A^\varepsilon(x + \delta(y - 1/2)) (\nabla \hat{\chi}^{i,h} + \mathbf{e}_i) \cdot (\nabla \hat{\chi}^{k,h} + \mathbf{e}_k) dy,$$

y las funciones $\hat{\chi}^{i,h}$ (resp. $\hat{\chi}^{k,h}$) son soluciones del problema microscópico

$$\int_A A^\varepsilon(x + \delta(y - 1/2)) \nabla \hat{\chi}^{i,h} \cdot \hat{z}^h dy = - \int_Y A^\varepsilon(x + \delta(y - 1/2)) \mathbf{e}_i \cdot \hat{z}^h dy, \forall \hat{z}^h \in S^q(Y, \mathcal{T}_h).$$

2.2.2. Aproximación de flujos en la frontera

Del problema homogeneizado (2.2), se puede probar, mediante integración por partes, que para $v \in H^1(\Omega)$,

$$\int_{\partial\Omega} (A^0 \nabla u^0 \cdot \nu) v = \int_{\Omega} A^0 \nabla u^0 \cdot \nabla v - \int_{\Omega} f v,$$

lo que corresponde a una formulación débil del flujo homogeneizado $A^0 \nabla u^0 \cdot \nu$. En adelante, se supone que Ω es un polígono y se consideran los siguientes subespacios de $S^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$:

$$\begin{aligned} S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H) &= \{v^H \in S^1(\Omega, \mathcal{T}_H) : v^H = 0 \text{ en las esquinas de } \Omega\} \\ S_i^1(\Omega, \mathcal{T}_H) &= \{v^H \in S^1(\Omega, \mathcal{T}_H) : v^H = 0 \text{ en los nodos internos de } \Omega\}. \end{aligned}$$

Además, se define $S_c^1(\partial\Omega, \mathcal{T}_H)$ como el espacio de dimensión finita de las funciones en $S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$ restringidas a $\partial\Omega$.

Suponiendo $u^{0,H}$ conocida, se busca aproximar el flujo sobre $\partial\Omega$. Sean Γ_j , $j = 1, \dots, n$ las interfaces rectas que definen a $\partial\Omega$. Sean $X_j(\Omega, \mathcal{T}_H)$, $j = 1, \dots, n$ las fibras de los elementos en \mathcal{T}_H que tienen al menos un vértice en Γ_j .

Un flujo aproximado puede construirse progresivamente para cada interfaz en la frontera, al ensamblar funciones en $S_c^1(\Gamma_j, \mathcal{T}_H)$, para $j = 1, \dots, n$, de manera que

$$\int_{\partial\Omega} A^{0,H} \nabla u^{0,H} \cdot \nu v^H = B_H^0(u^{0,H}, v^H) - \int_{\Omega} f v^H, \quad \forall v^H \in S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H) \cap S_i^1(\Omega, \mathcal{T}_H), \quad (2.17)$$

donde

$$B_H^0(u^H, v^H) := \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \frac{w_{K_j}}{|K_{\delta_j}|} \int_{K_{\delta_j}} A^{0,H} \nabla u_{K_j}^h \cdot \nabla v_{K_j}^h. \quad (2.18)$$

Para todo $v^H \in S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H) \cap S_i^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$, $v^H = 0$ sobre $\partial\Omega \setminus \Gamma_j$.

Así, reconstruir la aproximación del flujo homogeneizado $A^{0,H} \nabla u^H \cdot \nu$ lleva a resolver el sistema lineal cuyas incógnitas son los valores de $A^{0,H} \nabla u^H \cdot \nu$ en los nodos de la frontera.

A continuación, se mencionarán dos lemas de utilidad.

Lema 2.10 (Lema 5.1 en [4]) Sea $X = X(\Omega, \mathcal{T}_H)$ el conjunto de elementos en \mathcal{T}_H con al menos un vértice en $\partial\Omega$ y sea $v^H \in S_i^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$. Luego,

$$\|\nabla v^H\|_{L^2(X)} \leq CH^{-1/2} \|v^H\|_{L^2(\partial\Omega)}$$

Sea ahora Π^H el operador de interpolación lineal sobre $\partial\Omega$.

Lema 2.11 (Lema 4.1 en [38]) Se tiene la siguiente estimación del error de interpolación.

$$(A^0 \nabla u^0 \cdot \nu - \Pi^H(A^0 \nabla u^0 \cdot \nu), v^H)_{L^2(\partial\Omega)} \leq CH^{3/2} \|u^0\|_{H^3(\Omega)} \|v^H\|_{L^2(\partial\Omega)}$$

Con estos resultados, se puede probar el siguiente teorema:

Teorema 2.12 (Teorema 5.3 en [4]) Sea una familia de triangulaciones macroscópicas cuasi-uniformes $\{\mathcal{T}_H\}$. Se supone que el acoplamiento entre las mallas macro-micro siguen la relación $H = \mathcal{O}(h/\varepsilon)$. Sea u^0 solución del problema homogeneizado (2.2) en $H^3(\Omega)$ y $a_{ij}^0 \in W^{2,\infty}(\Omega)$. Entonces el flujo aproximado $A^{0,H} \nabla u^{0,H} \cdot \nu$ satisface:

$$\|A^0 \nabla u^0 \cdot \nu - A^{0,H} \nabla u^{0,H} \cdot \nu\|_{L^2(\partial\Omega)} \leq C \left(H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon} \right)^{3/2} \right)$$

Demostración: Para $v^H \in S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H) \cap S_i^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$, con $v^H = 0$ en $\partial\Omega \setminus \Gamma_j$,

$$(A^0 \nabla u^0 \cdot \nu - A^{0,H} \nabla u^H \cdot \nu, v^H)_{L^2(\partial\Omega)} = B(u^0, v^H) - B_H(u^H, v^H)$$

Se definen ahora las formas bilineales

$$\begin{aligned} \tilde{B}_H(v^H, w^H) &:= \sum_{k \in \mathcal{T}_H} |K| \int_K A^0(x_k) \nabla v_K^H \cdot \nabla w_K^H \\ \bar{B}_H(v^H, w^H) &:= \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \frac{|K|}{|K_\delta|} \int_{K_\delta} A^\varepsilon \nabla v_K \cdot \nabla w_K, \end{aligned}$$

donde v_K, w_K son las soluciones exactas del problema microscópico (2.16) en el espacio de funciones $W(K_\delta)$. Luego,

$$\begin{aligned} (A^0 \nabla u^0 - A^{H,0} \nabla u^H \cdot \nu, v^H)_{L^2(\partial\Omega)} &\leq |B^0(u^0, v^H) - \tilde{B}_H(\Pi^H u^0, v^H)| \\ &+ |\tilde{B}_H(\Pi^H u^0, v^H) - \bar{B}_H(u^H, v^H)| \\ &+ |\bar{B}_H(u^H, v^H) - B_H(u^H, v^H)| \\ &:= I_1 + I_2 + I_3, \end{aligned}$$

donde Π^H sorresponde al operador de interpolación. De [38], se tiene que

$$I_1 \leq CH^2(\|u^0\|_{H^3(\Omega)} + \|f\|_{H^2(\Omega)})\|\nabla v^H\|_{L^2(X_j)},$$

Por otro lado, se tiene (ver [1, 2]) que

$$I_3 \leq C\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^2\|\nabla u^H\|_{L^2(X_j)}\|\nabla v^H\|_{L^2(X_j)},$$

donde C no depende de δ ni x_K . El término I_2 captura un error de modelamiento, que se anula suponiendo que el tensor localmente periódico admite separación explícita entre variables lentas y rápidas. Así, gracias al Lema 2.10, se tiene que

$$(A^0\nabla u^0 \cdot \nu - A^{0,H}\nabla u^{0,H} \cdot \nu, v^H)_{L^2(\partial\Omega)} \leq C\left(H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^2 H^{-1/2}\right)\|v^H\|_{L^2(\partial\Omega)}.$$

Luego, tomando

$$v^H = \begin{cases} \Pi^H(A^0\nabla u^0 \cdot \nu) - A^{0,H}\nabla u^H \cdot \nu & \text{sobre } \Gamma_j \\ 0 & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \Gamma_j \end{cases}$$

y utilizando el Lema 2.11, resulta

$$\|A^0\nabla u^0 \cdot \nu - A^{0,H}\nabla u^H \cdot \nu\|_{L^2(\Gamma_j)} \leq C\left(H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^2 H^{-1/2}\right)$$

Como además $H = \mathcal{O}(h/\varepsilon)$, se obtiene finalmente

$$\|A^0\nabla u^0 \cdot \nu - A^{0,H}\nabla u^H \cdot \nu\|_{L^2(\Gamma_j)} \leq C\left(H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{3/2}\right).$$

Esto es cierto para cada $j = 1, \dots, n$. Sumando sobre j , se obtiene el resultado deseado. \square

2.2.3. Resolución del problema inverso discretizado

Para la resolución del problema inverso discretizado, se considera el modelo regularizado presentado en (2.14). Para resolver numéricamente el problema inverso, se discretiza el dominio utilizando elementos simpliciales, y se aproximan los espacios de elementos finitos macroscópicos y microscópicos utilizando polinomios lineales por trozos. Para resolver el problema inverso, se tendrán como entradas las mediciones de los flujos dados por el tensor multiescala $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega}$, el intervalo $[\alpha, \beta]$ y el mapeo $(s, y) \mapsto A(s, y), \forall s \in [\alpha, \beta], y = x/\varepsilon \in Y = (0, 1)^d$. Los flujos se escriben en términos de MEF, con diámetro de los elementos de la malla denotado por h_d . Luego, se define el conjunto admisible discreto

$$\mathcal{A}^H = \{m^H \in S^1(\Omega, \mathcal{T}_H) : \alpha \leq m^H \leq \beta\}. \quad (2.19)$$

El problema a minimizar se plantea como: encontrar $\sigma_\gamma^{\varepsilon, H} \in \mathcal{A}^H$ tal que

$$\Psi(\sigma_\gamma^{\varepsilon, H}) = \min_{m^H \in \mathcal{A}^H} \Psi(m^H), \quad (2.20)$$

donde

$$\begin{aligned}\Psi^H(m^H) &= \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu - A_m^{0,H} \nabla u_m^{0,H} \cdot \nu\|_{L^2(\partial\Omega)} + \gamma \|m^H\|_{H^1(\Omega)} \\ &= \Phi^H(m^H) + \gamma \|m^H\|_{H^1(\Omega)},\end{aligned}\tag{2.21}$$

donde se utiliza la notación $u_m^{0,H} := u_{m^H}^0$ para referirse a la solución del problema homogeneizado discretizado, dado por el tensor $A_m^{0,H} := A_{m^H}^0$.¹ El problema de minimización se resuelve mediante el método de Newton-Gradiente Conjugado Inexacto (NGCI).² En el Anexo A se da una descripción de este método aplicado a problemas de este tipo. Para cada $m^H \in \mathcal{A}^H$ obtenido en cada iteración, se calcula la solución $u_m^{0,H}$ del problema homogeneizado discreto: Encontrar $u_m^{0,H} \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H)$ tal que

$$B_H^0(u_m^{0,H}, v^H) = (f, v^H), \forall v^H \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H),\tag{2.22}$$

donde B_H^0 es el operador bilineal definido en (2.18). Una vez obtenido $u_m^{0,H}$, se calculan los flujos correspondientes a la descripción variacional dada en (2.17).

Cuando Ψ^H deja de decrecer, o su gradiente decrece bajo cierta tolerancia, el proceso de minimización termina. El conjunto \mathcal{A}^H es de dimensión finita y uniformemente acotado. Esto asegura la existencia de un minimizador $\sigma_\gamma^{\varepsilon,H} \in \mathcal{A}^H$ del problema discretizado (2.20), para cualquier $H > 0$, por compacidad y equivalencia de normas en espacios de dimensión finita. Una pregunta natural que surge es si una sucesión $(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H})_{H>0}$ de soluciones discretas convergen a un minimizador $\sigma_\gamma^\varepsilon$ del problema continuo cuando $H \rightarrow 0$, esto es, cuando se refina la malla. Para ello, se establece un resultado análogo al Lema 2.7, en su versión discreta. En particular, se supone en adelante que el error numérico del *solver* sólo depende de H y h/ε .

Lema 2.13 (Lema 5.4 en [4]) *Bajo las mismas suposiciones que para el Teorema 2.12, sea $(m^H)_{H>0}$ en $\mathcal{A}^H \subset \mathcal{A}$ una sucesión convergente en $L^r(\Omega)$, $r \geq 1$, a cierto $m \in \mathcal{A}$ cuando $H \rightarrow 0$. Luego, la sucesión de aproximaciones de elementos finitos de los flujos $(A_m^{0,H} \nabla u_m^{0,H} \cdot \nu)_{H>0}$ converge a $A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu$ en $L^2(\partial\Omega)$, cuando H y $h/\varepsilon \rightarrow 0$.*

Demostración: Directo del Lema 2.7 y el Teorema 2.12. \square

Gracias a este lema, se puede establecer la convergencia de las soluciones discretizadas $(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H})_{H>0}$. Sea $\sigma_\gamma^\varepsilon$ la solución del problema inverso regularizado en dimensión infinita, esto es,

$$\Psi(\sigma_\gamma^\varepsilon) = \min_{m \in \mathcal{A}} \Psi(m).\tag{2.23}$$

Teorema 2.14 (Teorema 5.5 en [4]) *Sea $(\sigma_\gamma^{0,H})_{H>0}$ una sucesión de minimizadores del problema (2.20). Luego, existe una subsucesión que converge débil en $H^1(\Omega)$ a un minimizador del problema continuo (2.23) cuando $H, h/\varepsilon \rightarrow 0$.*

Demostración: En primer lugar, se puede notar que las propiedades minimizantes de $(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H})_{H>0}$ implican que la sucesión $(\Psi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}))_{H>0}$ es uniformemente acotada, por lo que

¹Se elige esta notación para dar énfasis al hecho de que las soluciones y los tensores también son discretizados, obviando que el parámetro m también lo es.

²En [4], se utiliza el método del punto interior.

$(\|\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}\|_{H^1(\Omega)})_{H>0}$ es uniformemente acotada. Luego, existe una subsucesión $(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H'})_{H'>0}$ y algún $\sigma_\gamma^\varepsilon \in \mathcal{A}$ tal que $\sigma_\gamma^{0,H'} \rightharpoonup \sigma_\gamma^\varepsilon$ débil en $H^1(\Omega)$. Luego, por el Lema 2.13, se tiene que

$$A_m^{0,H'} \nabla u_m^{0,H'} \cdot \nu \rightarrow A_{\sigma_\gamma^\varepsilon}^0 \nabla u_{\sigma_\gamma^\varepsilon}^0 \cdot \nu \text{ en } L^2(\partial\Omega).$$

De la semicontinuidad inferior de las normas, se tiene que

$$\begin{aligned} \Psi(\sigma_\gamma^\varepsilon) &\leq \lim_{H,h/\varepsilon \rightarrow 0} \Phi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}) + \liminf_{H \rightarrow 0} \|\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}\|_{H^1(\Omega)}^2 \\ &\leq \liminf_{H,h/\varepsilon \rightarrow 0} (\Phi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}) + \|\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}\|_{H^1(\Omega)}^2) \\ &\leq \liminf_{H,h/\varepsilon \rightarrow 0} \Psi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}) \end{aligned}$$

Sólo queda probar que $\sigma_\gamma^\varepsilon$ efectivamente es un minimizador del problema continuo (2.23). Como $\mathcal{C}^\infty(\bar{\Omega})$ es denso en $H^1(\Omega)$, se tiene que para $m \in \mathcal{A}$, existe una sucesión $(m_\eta)_{\eta>0} \in \mathcal{C}^\infty(\bar{\Omega}) \cap \mathcal{A}$ tal que

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \|m_\eta - m\|_{H^1(\Omega)} = 0. \quad (2.24)$$

Sea $\Pi^H : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}^H$ el operador de interpolación lineal. De las propiedades minimizantes de $(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H})_{H>0}$, se tiene que

$$\Psi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}) \leq \Psi^H(\Pi^H m_\eta), \forall \eta > 0.$$

Tomando límite cuando $H, h/\varepsilon \rightarrow 0$, se tiene que, por las propiedades de Π^H , el Lema 2.13 y el Teorema 2.12, que

$$\Psi(\sigma_\gamma^\varepsilon) \leq \Psi(m_\eta).$$

Tomando límite cuando $\eta \rightarrow 0$, se tiene, por el Lema 2.13 y (2.24) que

$$\Psi(\sigma_\gamma^\varepsilon) \leq \Psi(m), \forall m \in \mathcal{A},$$

con lo que se concluye. \square

A modo de síntesis, se presenta un algoritmo para la resolución del problema inverso multiescala utilizando homogeneización numérica.

Algoritmo 2.15 (*Resolución numérica del problema inverso elíptico mediante homogeneización numérica*)

Entradas: Flujos $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega}$, el intervalo $[\alpha, \beta]$ y el parámetro de regularización $\gamma > 0$.

Inicializar: Elegir $m^H \in \mathcal{A}^H$ inicial (arbitrario). Para cada nueva actualización $m^H \in \mathcal{A}^H$ se procede como sigue:

1. Resolver el problema homogeneizado discreto: Encontrar $u_m^{0,H} \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H)$ que resuelve el problema (2.22):

$$B_H^0(u_m^{0,H}, v^H) = (f, v^H), \forall v^H \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H),$$

donde $B_H^0(u^H, v^H)$ está dado por (2.18).

2. Calcular los flujos aproximados $A_m^{0,H} \nabla u_m^{0,H} \cdot \nu|_{\partial\Omega}$ resolviendo (2.17).

3. Evaluar $\Psi^H(m^H)$ dado por (2.21).

4. Terminar cuando se alcance cierta tolerancia.

Observación 2.16 Como se mencionó anteriormente, la actualización de m^H se realiza mediante un método de NGCI, descrito en el Anexo A.

2.3. Experimentos numéricos

En esta sección se presentan experimentos para ilustrar, ejemplificar y validar experimentalmente el método propuesto para la resolución del problema inverso elíptico multiescala.

2.3.1. Caso simplificado

Antes de considerar el caso multiescala, se verá un ejemplo más simple, de una escala y donde, en lugar de un tensor, el parámetro mismo esté asociado a la ecuación de estado.

El dominio a considerar es

$$\Omega = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : 0 < x_1, x_2 < 1\}$$

Se considera la ecuación de estado

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\sigma \nabla u) = f & \text{en } \Omega \\ u = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.25)$$

donde $f(x) = x_1 + x_2$ y $\sigma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ es la función escalar a estimar, dada por

$$\sigma(x) = 16(x_1^2 - x_1)(x_2^2 - x_2) + 1. \quad (2.26)$$

De esta manera, el funcional a minimizar es de la forma

$$\Psi^H(m^H) = \|\sigma \nabla u_\sigma \cdot \nu - m^H \nabla u_m^H \cdot \nu\|_{L^2(\partial\Omega)}^2 + \gamma \|m^H\|_{H^1(\Omega)}^2, \quad (2.27)$$

donde u_σ es solución de la ecuación (2.25) y u_m^H es solución del problema

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(m^H \nabla u) = f & \text{en } \Omega \\ u = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.28)$$

Para la resolución numérica de este y todos los experimentos de la tesis, se utilizó FEniCS (ver [29]), que es una librería de Python que resuelve numéricamente EDPs mediante Métodos de Elementos Finitos, utilizando a su vez PETSc (ver [10]). Se utilizó además la librería de Python dolfin-adjoint (ver [34]), que permite resolver problemas de optimización con

restricciones de EDP utilizando FEniCS. Para distintos valores de γ , se obtuvieron distintos resultados para m^H y u_m^H obtenidos al minimizar Ψ^H . La Tabla 2.1 reporta los errores en norma $L^2(\Omega)$.

γ	$\ \sigma - m^H\ _{L^2(\Omega)}$	$\ u_\sigma - u_m^H\ _{L^2(\Omega)}$
10^{-6}	$1,812226 \cdot 10^{-1}$	$1,035756 \cdot 10^{-3}$
10^{-7}	$6,530805 \cdot 10^{-2}$	$2,382079 \cdot 10^{-4}$
10^{-8}	$6,457852 \cdot 10^{-2}$	$6,925937 \cdot 10^{-5}$

Tabla 2.1: Errores en norma $L^2(\Omega)$ del parámetro σ estimado y la solución de la ecuación del problema directo correspondiente u_σ , para distintos valores de γ . En todos los casos, se utilizó $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$.

Se observa que los errores disminuye a medida que se escoge un menor valor para γ , siendo esta diferencia más notable en el caso de los errores de la solución del problema directo u_m^H , donde los errores varían en órdenes de magnitud. Para $\gamma = 10^{-8}$, en la Figura 2.1 se visualizan el parámetro buscado σ y el control obtenido m^H .

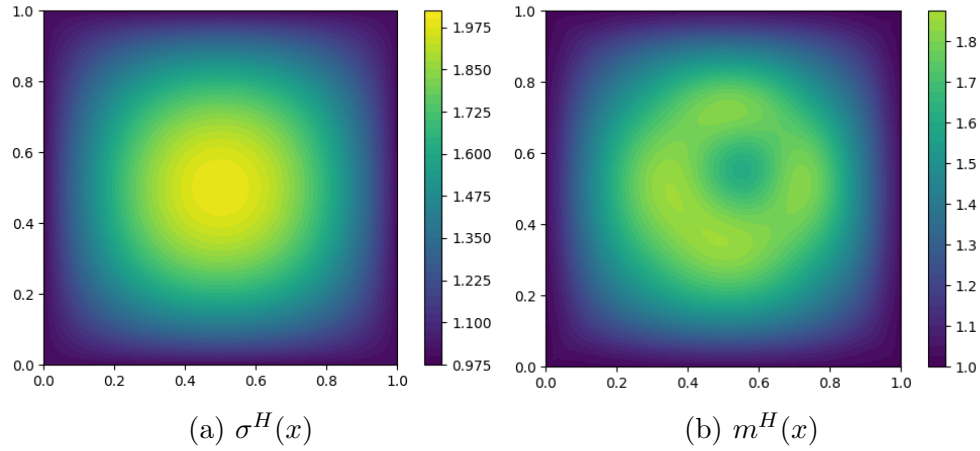


Figura 2.1: En (a) se visualiza la función a estimar discretizada σ^H . En (b) se visualiza la función obtenida m^H al minimizar Ψ^H con $\gamma = 10^{-8}$, y $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$.

2.3.2. Caso multiescala

Para el segundo experimento, se considera un modelo multiescala, donde el dominio Ω es el cuadrado unitario, al igual que en el primer ejemplo, y el tensor asociado es anisotrópico afín con respecto al parámetro σ . La ecuación de estado es el problema

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A_\sigma^\varepsilon \nabla u^\varepsilon) = f & \text{en } \Omega \\ u^\varepsilon = 0 & \text{sobre } \partial\Omega, \end{cases} \quad (2.29)$$

donde el término fuente f y la función escalar a estimar σ son iguales al caso simplificado, y el tensor A_σ^ε es de la forma

$$A_\sigma^\varepsilon(x) = \sigma(x) \begin{pmatrix} \cos^2(2\pi\frac{x_1}{\varepsilon}) + 1 & 0 \\ 0 & \text{sen}(2\pi\frac{x_2}{\varepsilon}) + 2 \end{pmatrix}.$$

Se considera la celda de referencia $Y = (0, \varepsilon)^2$. De esta manera, para $y = (y_1, y_2) \in Y$, el tensor se puede reescribir como

$$A_\sigma^\varepsilon(x) = A_\sigma(x, y) = \sigma(x) \begin{pmatrix} \cos^2(2\pi y_1) + 1 & 0 \\ 0 & \text{sen}(2\pi y_2) + 2 \end{pmatrix}.$$

Para $m^H \in \mathcal{A}^H$ se definen los tensores multiescala $A_m^{\varepsilon, H}(x)$ como

$$A_m^{\varepsilon, H}(x) = A_m^H(x, y) = m^H(x) \begin{pmatrix} \cos^2(2\pi y_1) + 1 & 0 \\ 0 & \text{sen}(2\pi y_2) + 2 \end{pmatrix}.$$

Estos tensores se homogeneizan, obteniendo así los tensores $A_m^{0, H}$, a partir de los cuales se pueden calcular las soluciones u^H de la ecuación (2.22), y con ello, se pueden calcular los flujos $A_m^{0, H} \nabla u_m^H \cdot \nu|_{\partial\Omega}$. Esto, más los flujos reales $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega}$ (que se consideran datos), permiten evaluar el funcional $\Psi^H(m^H)$ definido en (2.21).

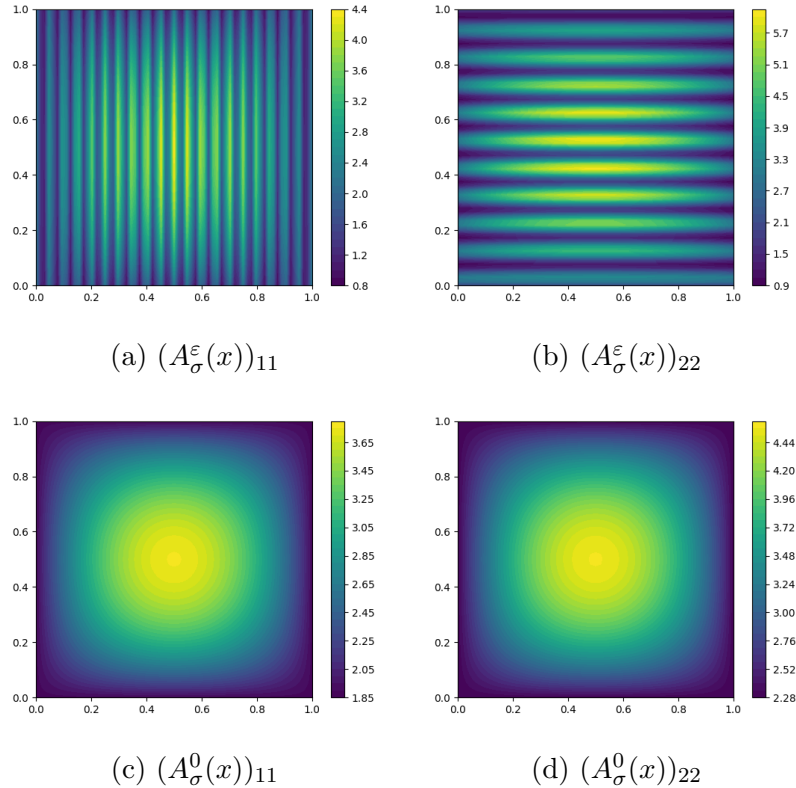


Figura 2.2: En (a), (b) se visualizan las componentes de los tensores multiescala para $\varepsilon = 10^{-1}$. En (b) y (c), se visualizan las componentes del tensor homogeneizado.

En primer lugar, se verifica la convergencia del problema directo para distintos valores de ε utilizando el método de FE-HMM. Esto es, utilizando el parámetro conocido σ , se calculan los errores entre la solución del problema multiescala y del problema homogeneizado:

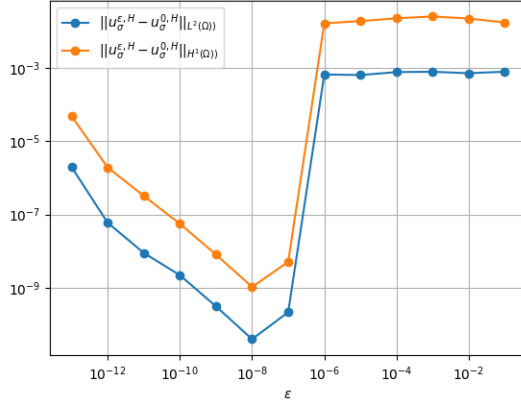
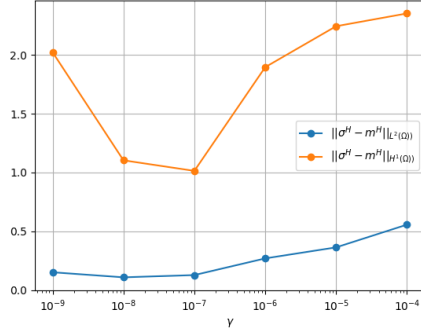


Figura 2.3: Errores en norma $L^2(\Omega)$ y $H^1(\Omega)$ entre las soluciones del problema directo multiescala y homogeneizado, ambos definidos por el parámetro σ . En todos los casos, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h = H\varepsilon$.

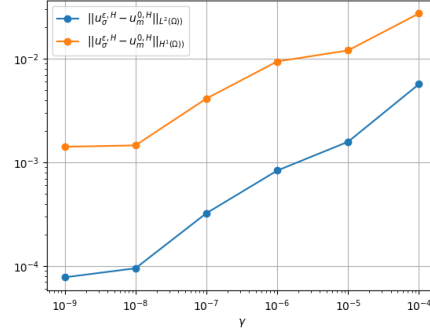
En la figura 2.3, se aprecia la convergencia de las soluciones para valores de ε suficientemente pequeños, esto es, a partir de $\varepsilon = 10^{-7}$. Se aprecia que el error mínimo se alcanza en $\varepsilon = 10^{-8}$, y para valores más pequeños de ε , el error aumenta, aunque sigue siendo razonablemente pequeño en comparación a los errores asociados a $\varepsilon > 10^{-6}$. Una posible explicación del aumento en el error puede deberse a las diferencias de diámetro de la malla microscópica h en cada caso, por lo que posiblemente, a medida que se toma un ε más pequeño, la malla microscópica debe refinarse aún más. Para ello habría que establecer una constante $C > 0$ ideal de manera que $H = Ch/\varepsilon$. En síntesis, los valores del gráfico permiten validar la convergencia de las soluciones de los problemas directos multiescala a la solución del problema directo homogeneizado, aunque se deben tener consideraciones numéricas para valores de ε demasiado pequeños.

En los experimentos del caso multiescala, y para un máximo de 100 iteraciones, no se llegó a la tolerancia establecida para el método de NGCI de 10^{-9} (que sí se alcanzaron o acercaron bastante en el caso simplificado). A partir de cierto punto, las reducciones del gradiente se mantenían usualmente en el orden de 10^{-6} . A partir de este momento, el funcional Ψ^H no presentaba reducciones significativas en cuanto a órdenes de magnitud en cada iteración. Esto no quiere decir que la tolerancia nunca se alcanzaría, pero sí que tomaría mucho tiempo y memoria. Por esto, las soluciones del problema inverso obtenidas no son tan precisas como se pretendía.

La Figura 2.4 muestra los errores de del parámetro encontrado m^H y las soluciones u^H respectivas al minimizar el funcional Ψ^H , para distintos valores de γ .



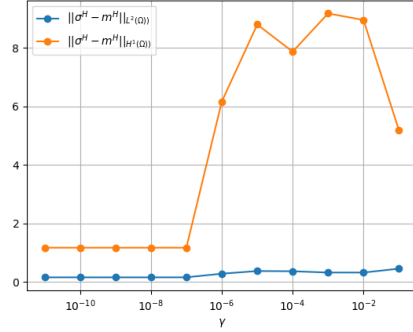
(a)



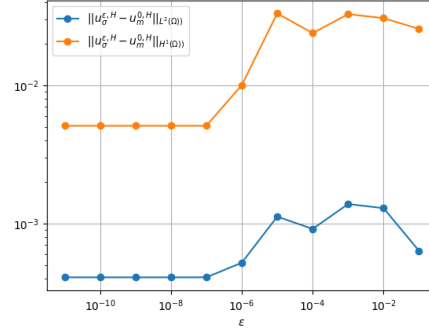
(b)

Figura 2.4: Errores de estimación para distintos valores de γ . En (a) se visualizan los errores del parámetro m^H obtenido, y en (b), para las soluciones del problema directo homogeneizado respectivo $u_m^{0,H}$. Para todos los valores de γ , se consideró $\varepsilon = 10^{-8}$, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h \approx 2,2 \cdot 10^{-10}$.

En la Figura 2.4 (a), se ve que los experimentos realizados arrojan una disminución del error entre los parámetros m^H y σ^H para valores de γ entre 10^{-7} y 10^{-8} . Al tomar el valor $\gamma = 10^{-5}$, el error aumenta de manera más notable. A pesar de ello, en todos los casos los errores se mantuvieron en un orden de magnitud de 10^{-1} . En la Figura 2.4 (b), se ve que los errores aumentan en la medida que aumenta γ , siendo esta diferencia más notable, sobre todo para los errores en norma $L^2(\Omega)$, ya que para esta norma, los errores varían en órdenes de magnitud. Se obtuvo el error más bajo para $\gamma = 10^{-11}$, donde el error en norma $L^2(\Omega)$ fue aproximadamente $1,80 \cdot 10^{-4}$, y $1,86 \cdot 10^{-2}$ en norma $H^1(\Omega)$. Los experimentos sugieren que son preferibles las elecciones de γ cercanas (pero no iguales) a 0. Al igual que en el caso simplificado, se ve que los errores son menores para los menores valores de γ escogidos, siendo esta diferencia más notable en el error de las soluciones del problema directo $u_m^{0,H}$ que de los parámetros obtenidos m^H . A partir de esto, se podría plantear la opción de elegir $\gamma = 0$, esto es, sin el término regularizador. Sin embargo, el método no convergía con esta elección de γ y se comportaba de manera más oscilante. Esto puede deberse a la naturaleza altamente oscilatoria del funcional sin el término regularizador. Esto requeriría un refinamiento mayor de las mallas (macroscópicas y microscópicas), lo que se traduce en un costo computacional mayor.



(a)



(b)

Figura 2.5: Errores de estimación para distintos valores de ε . En (a) se visualizan los errores del parámetro m^H obtenido, y en (b), para las soluciones del problema directo homogeneizado respectivo $u_m^{0,H}$. Para todos los valores de ε , se consideró $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-8}$, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h = \varepsilon H$.

De la Figura 2.5 (a), se observa que los errores del parámetro buscado a medida que se tomaban valores ε menores a 10^{-7} se mantenían prácticamente constantes. Para valores más grandes de ε , estos errores no varían considerablemente en norma $L^2(\Omega)$, pero sí en norma $H^1(\Omega)$. En (b), también se observa que los errores se mantienen prácticamente constantes para valores de ε menores a 10^{-7} . Estos errores aumentan tanto en norma $L^2(\Omega)$ como $H^1(\Omega)$ para valores más altos de ε .

Capítulo 3

Problema inverso parabólico

Este capítulo consiste en estudiar un problema inverso análogo al del Capítulo 2, pero para un problema parabólico. Por tanto, el análisis (tanto abstracto como numérico) está basado en el capítulo anterior. Tal como se mencionó en la introducción de dicho capítulo, el estudio del problema elíptico consistió principalmente en una revisión del trabajo hecho por Abdulle y Di Blasio en [4], por lo mismo, nada de lo dicho en ese capítulo es una innovación de la presente tesis. Sin embargo, en este capítulo, e inspirado en el trabajo de dicho artículo, se propone un análisis y manera de abordar el problema de manera similar, pero en el contexto parabólico. Es decir, este capítulo sí es un aporte, pues, al menos bajo el conocimiento del autor, no se ha abordado de esta manera el problema parabólico planteado. Otro artículo crucial para el desarrollo de este capítulo corresponde al trabajo desarrollado por Yuan y Yamamoto en [41], que da condiciones de estabilidad sobre un problema inverso (ligeramente distinto al que se plantea en esta tesis) que permiten proponer un método para resolver el problema inverso planteado. Los resultados de este último artículo, sin embargo, no se presentan en un contexto multiescala, por lo que se tendrá que adaptar a este contexto.

3.1. Análisis

Para $T > 0$ y $\varepsilon > 0$ dados, se quiere encontrar u^ε que resuelve el siguiente problema directo parabólico multiescala

$$\begin{cases} \partial_t u^\varepsilon - \operatorname{div}(A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon) = f, & \text{en } Q := (0, T) \times \Omega \\ u^\varepsilon = 0, & \text{sobre } \Sigma := (0, T) \times \partial\Omega \\ u^\varepsilon(0, \cdot) = u_0, & \text{en } \Omega, \end{cases} \quad (3.1)$$

donde $f \in \mathcal{C}_0^\infty((0, T) \times \omega)$, para algún abierto $\omega \subset \Omega$, $u_0 \in L^2(\Omega)$, y el tensor A^ε está en la familia $\mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ definida en 1.1, para ciertos $0 < \alpha < \beta$. El problema (3.1) tiene solución en $\mathcal{C}([0, T]; L^2(\Omega)) \cap \mathcal{C}((0, T); H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)) \cap \mathcal{C}^1((0, T), L^2(\Omega))$ (ver, por ejemplo, [37]).

El problema inverso asociado consiste en determinar A^ε a partir de mediciones de las soluciones u^ε en ciertos momentos del tiempo, y de los flujos $A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon \cdot \nu|_{\Gamma_0}$, donde $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ es

un abierto no vacío. Tal como se dijo en el Capítulo 1, se consideran las Hipótesis 1.2 para la familia de tensores $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$.

Antes de estudiar el problema inverso multiescala, se revisarán los resultados principales de estabilidad para un problema inverso parabólico en el caso no multiescala.

3.1.1. Estabilidad del problema inverso parabólico, caso no multiescala

Yuan y Yamamoto demostraron en [41], a partir de estimaciones de tipo Carleman, unicidad y estabilidad para un problema inverso asociado al problema parabólico en su versión no multiescala, esto es,

$$\begin{cases} \partial_t u - \operatorname{div}(A\nabla u) = f, & \text{en } Q \\ u = 0, & \text{sobre } \Sigma \\ u(0, \cdot) = u_0, & \text{en } \Omega, \end{cases} \quad (3.2)$$

donde esta vez el tensor A sólo depende de una variable macroscópica $x \in \Omega$.

Sea $N > d/2 + 3$ en \mathbb{N} . Para $l \in \mathbb{N}_0$, $m_0 \in \left\{0, 1, \dots, 2\left[\frac{N+1}{2}\right]\right\}$ y $0 < \tau_1, \tau_2 < T$, se puede probar (ver, por ejemplo, [37]) que si u es solución del problema directo parabólico (ya sea multiescala (3.1) o no multiescala (3.2)), entonces

$$\|u\|_{C^l(\tau_1, \tau_2; H^{m_0}(\Omega))} \leq C(\|u_0\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{W^{l,1}(0,T; H^{m_0}(\omega))}). \quad (3.3)$$

El análisis hecho por Yuan y Yamamoto también aplica para ecuaciones parabólicas más generales¹:

$$\partial_t u - \operatorname{div}(A\nabla u) - \vec{b} \cdot \nabla u - cu = f.$$

El problema inverso planteado por Yuan y Yamamoto es el siguiente:

Definición 3.1 (*Problema inverso de Yuan y Yamamoto*) Sean $\tau_1 < \theta < \tau_2 \in (0, T)$ fijos, $\emptyset \neq \Gamma_0 \subset \partial\Omega$ un abierto (en $\partial\Omega$). El problema inverso consiste en elegir $l_0 \in \mathbb{N}$, $(f_l)_{l=1}^{l_0} \subset C^\infty((0, T) \times \omega)$ adecuados y determinar el tensor A , a partir de mediciones de $\partial_\nu u[f_l]$ en $(\tau_1, \tau_2) \times \Gamma_0$ y $u[f_l](\theta, \cdot)$ en Ω , para cada $l = 1, \dots, l_0$, donde $u[f_l]$ es la solución del problema (3.2) con término fuente f_l .

En el presente trabajo se aplica el resultado de estabilidad y unicidad para el problema inverso de interés, que es una variación del Problema Inverso de Yuan y Yamamoto. La primera diferencia se refiere a las mediciones consideradas y la segunda diferencia es el hecho de que el tensor involucrado es multiescala. Más específicamente, el problema inverso de interés para esta tesis es el siguiente:

Definición 3.2 (*Problema inverso parabólico multiescala*) Sean $\tau_1 < \theta < \tau_2 \in (0, T)$ fijos, $\emptyset \neq \Gamma_0 \subset \partial\Omega$ un abierto (en $\partial\Omega$). El problema inverso consiste en elegir $l_0 \in \mathbb{N}$, $(f_l)_{l=1}^{l_0} \subset C^\infty((0, T) \times \omega)$ adecuados y determinar el tensor A^ε , a partir de mediciones de $A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon[f_l] \cdot \nu$

¹La EDP asociada al Problema de Transporte es de esta forma, con $c = 0$.

en Γ_0 y $u^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot)$ en Ω , para cada $l = 1, \dots, l_0$, donde $u^\varepsilon[f_l]$ es solución del problema (3.1) con término fuente f_l .

Como se mencionó anteriormente, se consideran tensores que satisfacen las Hipótesis 1.2. Con esto, resolver el problema inverso de la Definición 3.2 se reduce a encontrar $\sigma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ que defina al tensor $A^\varepsilon = A_\sigma^\varepsilon$ buscado.

A continuación, se introducen definiciones y notaciones que serán de utilidad para establecer el resultado de estabilidad y unicidad con claridad.

Definición 3.3 Dado $N > d/2 + 3$, se define el espacio de Hölder² $\mathcal{C}^{N,1}(\bar{\Omega})$ de exponente 1 y orden N (o bien, de las funciones Lipschitz-continuas de orden N) como

$$\mathcal{C}^{N,1}(\bar{\Omega}) := \{a \in \mathcal{C}^N(\bar{\Omega}) : \partial_x^\alpha a \text{ es Lipschitz}, \forall \alpha \in \mathbb{N}^N \text{ con } |\alpha| \leq N\}^3,$$

Donde $|\alpha| := \sum_{i=1}^N |\alpha_i|, \forall \alpha \in \mathbb{N}^N$. Al espacio $\mathcal{C}^{N,1}(\bar{\Omega})$ se le dota la norma

$$\|a\|_{\mathcal{C}^{N,1}(\bar{\Omega})} = \|a\|_{\mathcal{C}^N(\bar{\Omega})} + \max_{|\alpha| \leq N} \sup_{x_1 \neq x_2 \in \Omega} \frac{|\partial_x^\alpha a(x_1) - \partial_x^\alpha a(x_2)|}{|x_1 - x_2|}$$

Definición 3.4 Sean $0 < \alpha < \beta$, $M_0 > 0$ y un conjunto de funciones suaves $\eta := \{\eta_{ij}\}_{i,j=1}^d$ en $\bar{\Omega}$. Sea además $\omega_1 := \{x \in \Omega : \text{dist}(x, \partial\Omega) < r_0\}$, para algún r_0 suficientemente pequeño. Notar que ω_1 es un borde de grosor r_0 , y que $\partial\Omega \subset \partial\omega_1$. se define el conjunto de tensores

$$\mathcal{U}[M_0, \eta] := \left\{ A \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega) \cap (\mathcal{C}^{N,1}(\bar{\Omega}))^{d \times d} : \|a_{ij}\|_{\mathcal{C}^{N,1}(\bar{\Omega})} \leq M_0 \text{ y } a_{ij}|_{\omega_1} = \eta_{ij}, \forall i, j = 1, \dots, d \right\}$$

Observación 3.5 En adelante, se denotará simplemente $\mathcal{U}[M_0, \eta] = \mathcal{U}$, a menos que sea necesario especificar M_0 y η .

Además, se considera que existe $M > 0$ tal que $\|u[A, f](0, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} \leq M$, para todo $A \in \mathcal{U}$ donde $u[A, f]$ denota la solución del problema parabólico asociado al tensor A y el término fuente f .

Para $l_0 = \frac{d(d+3)}{2}$, se demuestra el siguiente resultado de estabilidad (Teorema 1.2 en [41]):

Teorema 3.6 Sean $0 < \tau_1 < \theta < \tau_2 < T$, $\emptyset \neq \Gamma_0 \subset \partial\Omega$ abierto en $\partial\Omega$. Sea $A = (a_{ij})_{i,j=1}^d \in \mathcal{U}$ fijo. Se pueden elegir $(f_l)_{l=1}^{l_0} \subset \mathcal{C}_0^\infty((0, T) \times \omega)$ tales que, para todo $\bar{A} = (\bar{a}_{ij})_{i,j=1}^d \in \mathcal{U}$,

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^d \|\bar{a}_{ij} - a_{ij}\|_{H^1(\Omega)} &\leq C \sum_{l=1}^{l_0} \|\partial_\nu u[\bar{A}, f_l] - \partial_\nu u[A, f_l]\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \\ &+ C \sum_{l=1}^{l_0} \|u[\bar{A}, f_l](\theta, \cdot) - u[A, f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)}, \end{aligned}$$

donde $C > 0$ es una contante que depende de \mathcal{U} , M y $\{f_l\}_l$.

²Ver, por ejemplo, [20], Capítulo 5.

³Si bien se ha utilizado $\alpha > 0$ anteriormente para definir los tensores en $\mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$, en la definición de $\mathcal{C}^{N,1}(\bar{\Omega})$ también se optó por denotar a los multiíndices por α , dado que es lo que se utiliza convencionalmente en la literatura. Se espera que el contexto de su uso sea suficiente para que no exista confusión.

Observación 3.7 *La unicidad del problema inverso es directa de este teorema. En efecto, si las observaciones son iguales, el lado derecho de la desigualdad es nulo, por lo que el lado izquierdo también, y con esto, los tensores son iguales.*

La existencia de los términos fuente útiles para el resultado de estabilidad está garantizada por el siguiente resultado de densidad (Proposición 1.1 en [41]).

Proposición 3.8 *Sea $m_1 = \left\lceil \frac{N+1}{2} \right\rceil$. Sea $A \in \mathcal{U}$. Luego, para cada $\theta > 0$ y condición inicial $u_0 \in L^2(\Omega)$, el conjunto*

$$\{u[A, f, u_0](\theta, \cdot) : f \in \mathcal{C}_0^\infty((0, T) \times \omega)\}$$

es denso en $\mathcal{D}(\mathcal{A}^{m_1}) = \{u \in H^{2m_1}(\Omega) : \mathcal{A}^j u|_{\partial\Omega} = 0, \forall 1 \leq j \leq m_1 - 1\}$, donde $\mathcal{A}u(x) = -\text{div}(A(x)\nabla u(x))$, con $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$.

Con este teorema, dado $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ y una tolerancia $\delta > 0$, existe $f \in \mathcal{C}_0^\infty((0, T) \times \omega)$ tal que

$$\|u[A, f](\theta, \cdot) - \rho\|_{H^{2m_1}(\Omega)} \leq \delta.$$

Por el teorema de embebimiento de Sobolev, se tiene que

$$\|u[A, f](\theta, \cdot) - \rho\|_{C^2(\bar{\Omega})} \leq C\delta.$$

Con esto, una manera de encontrar explícitamente los términos fuente $(f_l)_{l=1}^{l_0}$, es resolviendo un problema de controlabilidad aproximada, definido a continuación.

Definición 3.9 *(Problema de controlabilidad aproximada) Para cierto $\delta > 0$ pequeño, se define el problema de controlabilidad aproximada como el siguiente problema de minimización:*

$$\begin{aligned} & \min_f \frac{1}{2} \|f\|_{L^2((0, T) \times \omega)}^2 \\ & \text{sujeto a } \begin{cases} f \in \mathcal{C}_0^\infty((0, T) \times \omega) \\ \|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{C^2(\bar{\Omega})} \leq \delta, \end{cases} \end{aligned}$$

donde $\rho \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ y $u[f]$ es solución del problema directo parabólico (3.2) asociado al tensor A y el término fuente f .

En el Anexo B se detalla el análisis y resolución numérica del problema de controlabilidad aproximada y algunas variantes del mismo que también podrían considerarse. En adelante se considerará $l_0 = \frac{d(d+3)}{2}$ fijo.

De la demostración del Teorema 3.6 (ver [41], Teorema 1.2), una elección adecuada de las funciones $(\rho_l)_{l=1}^{l_0}$ se obtiene como sigue: en primer lugar, se escoge cualquier matriz real $B = (b_{ij})_{i,j}^d$ tal que $\det(B) > 0$. Luego, se define para cada $i = 1, \dots, d$, la función

$$\tilde{g}_i(x) = \sum_{j=1}^d b_{ij} x_j. \tag{3.4}$$

Se definen además

$$\begin{aligned}
\hat{g}_1(x) &= x_1^2, \hat{g}_2(x) = 2x_1x_2, \hat{g}_3(x) = 2x_1x_3, \dots, \hat{g}_d(x) = 2x_1x_d, \\
\hat{g}_{d+1}(x) &= x_2^2, \hat{g}_{d+2}(x) = 2x_2x_3, \dots, \hat{g}_{2d-1}(x) = 2x_2x_d, \\
&\vdots \\
\hat{g}_{\frac{d(d+1)}{2}-2}(x) &= x_{d-1}^2, \hat{g}_{\frac{d(d+1)}{2}-1}(x) = 2x_{d-1}x_d \\
\hat{g}_{\frac{d(d+1)}{2}}(x) &= x_d^2
\end{aligned}$$

A partir estas funciones, se definen las $\frac{(d+1)^2d}{2}$ funciones:

$$\begin{aligned}
g_1(x) &= \hat{g}_1(x), g_2(x) = \tilde{g}_1(x), \dots, g_{d+1} = \tilde{g}_d(x) \\
g_{d+2}(x) &= \hat{g}_2(x), g_{d+3}(x) = \tilde{g}_1(x), \dots, g_{2d+2}(x) = \tilde{g}_d \\
&\vdots \\
g_{\frac{d^3+2d^2-d}{2}}(x) &= \hat{g}_{\frac{d(d+1)}{2}}(x), g_{\frac{d^3+2d^2-d}{2}+1}(x) = \tilde{g}_1(x), \dots, g_{\frac{d^3+2d^2-d}{2}+d} = \tilde{g}_d(x).
\end{aligned}$$

Finalmente, las funciones $(\rho_l)_{l=1}^{l_0} \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ se eligen como

$$\rho_l := \chi_1 g_l, \forall l = 1, \dots, l_0, \quad (3.5)$$

donde $\chi_1 \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ es una función *cut-off* tal que $\chi_1 = 1$ en $\overline{\Omega \setminus \omega_1}$.

3.1.2. Homogeneización del problema

En primer lugar, se define la noción de G -convergencia en el contexto del problema parabólico multiescala (3.1).

Definición 3.10 (*G-convergencia, contexto parabólico*): Sean $T > 0$ y $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ una familia de tensores en $\mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$. Para cada $\varepsilon > 0$, sea $u^\varepsilon \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ la solución del problema parabólico (3.1). Sea además $u^0 \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ solución del problema parabólico

$$\begin{cases} \partial_t u^0 - \operatorname{div}(A^0 \nabla u^0) = f \text{ en } Q \\ u^0 = 0 \text{ sobre } \Sigma \\ u^0(t=0) = u_0 \text{ en } \Omega, \end{cases} \quad (3.6)$$

Se dice que el tensor A^ε G -converge al tensor $A^0 \in \mathcal{M}(\alpha', \beta', \Omega)$ si las soluciones u^ε satisfacen:

$$\begin{aligned}
u^\varepsilon &\rightharpoonup u^0 \text{ en } L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \\
A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon &\rightharpoonup A^0 \nabla u^0 \text{ en } (L^2(Q))^d
\end{aligned}$$

cuando $\varepsilon \rightarrow 0$.

Sea

$$V := \{v \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) : \partial_t v \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))\} \quad (3.7)$$

dotado de la norma

$$\|v\|_V = \|v\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + \|\partial_t v\|_{L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))}.$$

La ecuación (3.1) tiene una única solución débil en V (ver [30]). Además, se tiene la inclusión continua $V \subset \mathcal{C}^0(0, T; L^2(\Omega))$ (ver, por ejemplo, [20], Sección 5.9.2). Esta inclusión, junto con la estimación (3.3) con $l = m_0 = 0$ implican que

$$\|u^\varepsilon\|_V \leq C(\|u_0\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{L^1(0,T;L^2(\Omega))})$$

Es decir, la familia $(u^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ es acotada en V . Así, la familia es débil-compacta, esto es, existe una subsucesión $(u^{\varepsilon'})_{\varepsilon'>0}$, tal que, cuando $\varepsilon' \rightarrow 0$,

$$u^{\varepsilon'} \rightharpoonup u^0 \text{ débil en } L^2(0, T; H_0^1(\Omega)), \partial_t u^{\varepsilon'} \rightharpoonup \partial_t u^0 \text{ débil en } L^2(0, T; H^{-1}(\Omega)). \quad (3.8)$$

Sean $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ de la forma $A^\varepsilon(x) = A(x, y) =: (a_{ij}^\varepsilon(x, y))_{i,j=1}^d$, con $y = x/\varepsilon \in Y$. La teoría de homogeneización (ver, por ejemplo, [11, 12, 15]) asegura que los tensores $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$, del problema (3.1) G -convergen, cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, al tensor A^0 que define el problema (3.6), donde $A^0 = (a_{ij}^0)_{i,j=1}^d$ es el tensor homogeneizado dado por

$$a_{ij}^0(x) = \frac{1}{|Y|} \int_Y a_{ij}(x, y) dy - \frac{1}{|Y|} \sum_{k=1}^d \int_Y a_{ij}(x, y) \frac{\partial \hat{\chi}_j}{\partial y_k} dy, \quad \forall i, j = 1, \dots, d. \quad (3.9)$$

Las funciones microscópicas $\hat{\chi}_j$ son las únicas soluciones del problema de celda: encontrar $\hat{\chi}_j \in W_{per}^1(Y)$ tal que

$$\int_Y A(x, y) \nabla_y \hat{\chi}_j \cdot \nabla_y v dy = \int_Y A(x, y) \mathbf{e}_j \cdot \nabla_y v dy, \quad \forall v \in W_{per}^1(Y), \quad (3.10)$$

donde $(\mathbf{e}_j)_{j=1}^d$ es la base canónica de \mathbb{R}^d , $W_{per}^1(Y) = \{v \in H_{per}^1(Y) : \int_Y v dy = 0\}$ y $H_{per}^1(Y)$ es la cerradura en $\|\cdot\|_{H^1(Y)}$ de las funciones periódicas en Y , $\mathcal{C}_{per}^\infty(Y) \subset \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Al igual que en el Capítulo 2, será de utilidad considerar el tensor homogeneizado A^0 en la resolución del problema inverso multiescala, debido a la estrecha relación que tiene con los tensores A^ε y que su comportamiento depende del promedio de los tensores A^ε , lo que permite pasar de la descripción multiescala del problema a una descripción sólo macroscópica.

3.1.3. Aplicación del resultado de estabilidad al caso multiescala

A continuación, se aplicará el resultado de estabilidad del Teorema 3.6 para el problema inverso de interés definido en la Definición 3.2.

Para el problema parabólico también se trabajará en el conjunto de parámetros admisibles \mathcal{A} , definidos en (2.8). En adelante, se supondrá $m, \sigma \in \mathcal{A}$. Notar que, para $i, j = 1, \dots, d$,

$$\|(a_\sigma^\varepsilon)_{ij} - (a_m^0)_{ij}\|_{H^1(\Omega)} \leq \|(a_\sigma^\varepsilon)_{ij} - (a_\sigma^0)_{ij}\|_{H^1(\Omega)} + \|(a_\sigma^0)_{ij} - (a_m^0)_{ij}\|_{H^1(\Omega)} \quad (3.11)$$

Si ahora $A_\sigma^0 \in \mathcal{U}$, $D(u^0[A_\sigma^0, f_l])(\theta, x) \neq 0, \forall x \in \overline{\Omega} \setminus \omega_1$ y además $A_m^0 \in \mathcal{U}$, entonces se puede aplicar el Teorema 3.6, para $A = A_\sigma^0$ y $\bar{A} = A_m^0$, de manera que

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^d \|(a_\sigma^0)_{ij} - (a_m^0)_{ij}\|_{H^1(\Omega)} &\leq C \sum_{l=1}^{l_0} \|\partial_\nu u_\sigma^0[f_l] - \partial_\nu u_m^0[f_l]\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \\ &+ C \sum_{l=1}^{l_0} \|u_\sigma^0[f_l](\theta, \cdot) - u_m^0[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Por otra parte,

$$\begin{aligned} \|\partial_\nu u_\sigma^0[f_l] - \partial_\nu u_m^0[f_l]\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} &\leq \|\partial_\nu u_\sigma^0[f_l] - \partial_\nu u_\sigma^\varepsilon[f_l]\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \\ &+ \|\partial_\nu u_m^0[f_l] - \partial_\nu u_\sigma^\varepsilon[f_l]\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \end{aligned} \quad (3.13)$$

y, análogamente,

$$\begin{aligned} \|u_\sigma^0[f_l](\theta, \cdot) - u_m^0[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)} &\leq \|u_\sigma^0[f_l](\theta, \cdot) - u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)} \\ &+ \|u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot) - u_m^0[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Así, aplicando las desigualdades (3.12), (3.13), (3.14) a (3.11), se obtiene la siguiente desigualdad:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^d \|(a_\sigma^\varepsilon)_{ij} - (a_m^0)_{ij}\|_{H^1(\Omega)} &\leq \sum_{i,j=1}^d \|(a_\sigma^\varepsilon)_{ij} - (a_\sigma^0)_{ij}\|_{H^1(\Omega)} \\ &+ C \left[\sum_{l=1}^{l_0} \|\partial_\nu u_\sigma^0 - \partial_\nu u_\sigma^\varepsilon\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \right. \\ &+ \sum_{l=1}^{l_0} \|\partial_\nu u_m^0 - \partial_\nu u_\sigma^\varepsilon\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \\ &+ \sum_{l=1}^{l_0} \|u_\sigma^0[f_l](\theta, \cdot) - u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)} \\ &\left. + \sum_{l=1}^{l_0} \|u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot) - u_m^0[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)} \right]. \end{aligned}$$

Así, una manera de minimizar el lado izquierdo en términos de $m \in \mathcal{A}$ (y con ello, estimar el tensor buscado A_σ^ε), es minimizar los términos del lado derecho que dependen de m .

Es decir, basta resolver el siguiente problema de minimización:

$$\begin{aligned} \min_{m \in \mathcal{A}} \sum_{l=1}^{l_0} &\left(\|\partial_\nu u_m^0[f_l] - \partial_\nu u_\sigma^\varepsilon[f_l]\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))}^2 + \|u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot) - u_m^0[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)}^2 \right) \\ \text{sujeto a } &\begin{cases} \partial_t u_m^0 - \operatorname{div}(A_m^0 \nabla u_m^0) = f_l \\ u_m^0 = 0 \text{ sobre } \Sigma \\ u_m^0(t=0) = u_0 \text{ en } \Omega. \end{cases} \end{aligned}$$

Notar que en esta función objetivo, se calculan los cuadrados de las normas, en lugar de las normas directamente. Esto es sólo por simplicidad de calcular normas en $L^2(\Omega)$. La justificación para calcular el cuadrado de cada norma en lugar del cuadrado de la suma de las normas, viene del simple hecho de que $(a + b)^2 \leq 2(a^2 + b^2)$, para todo $a, b \in \mathbb{R}$.

Ahora bien, en el caso de interés no se tienen mediciones directas de $\partial_\nu u_\sigma^\varepsilon$, sino del flujo $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu$. Por esto, se busca una función objetivo que contenga estos términos. Para ello, basta notar que

$$\begin{aligned} \|\partial_\nu u_m^0 - \partial_\nu u_\sigma^\varepsilon\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} &\leq \|\partial_\nu u_m^0 - A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \\ &\quad + \|A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu - A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \\ &\quad + \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu - \partial_\nu u_\sigma^\varepsilon\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Luego, para $A \in \mathcal{U}$, y u la solución del problema directo parabólico asociado a A , se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} \|\partial_\nu u - A \nabla u \cdot \nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} &= \|(I - A) \nabla u \cdot \nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \\ &\leq \|(I - A) \nabla u\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \|\nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \\ &\leq C \|\nabla u\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \\ &\leq C \|\nabla u\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\partial\Omega))} \\ &\leq C \|\nabla u\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; H^1(\Omega))} \\ &\leq C \|u\|_{C^3(\tau_1, \tau_2; H^1(\Omega))} \\ &\leq C (\|u_0\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{W^{3,1}(0, T; H^1(\omega))}), \end{aligned} \quad (3.16)$$

donde la última desigualdad corresponde a la estimación (3.3) con $l = 3$ y $m_0 = 1$. Además, se utilizó el teorema de la traza para la cuarta desigualdad. En cada desigualdad, se utiliza la misma notación para distintas constantes $C = C(A, \nu, \Gamma_0)$ y eventualmente otras variables que no dependan de la solución u .

Así, aplicando la desigualdad (3.16) para $A_\sigma^\varepsilon, A_m^0 \in \mathcal{U}$ en la desigualdad (3.15), se obtiene

$$\begin{aligned} \|\partial_\nu u_m^0 - \partial_\nu u_\sigma^\varepsilon\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} &\leq 2C (\|u_0\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{W^{3,1}(0, T; L^2(\omega))}) \\ &\quad + \|A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu - A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))} \end{aligned}$$

Con esto, para minimizar el lado izquierdo en función de m , basta minimizar lo que depende de m en el lado derecho, que es justamente lo que se buscaba, pues éste depende de las mediciones directas de los flujos multiescala $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu$. Así, el nuevo problema de minimización a considerar es el siguiente:

$$\min_{m \in \mathcal{A}} \sum_{l=1}^{l_0} \left(\|A_m^0 \nabla u_m^0[f_l] \cdot \nu - A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon[f_l] \cdot \nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))}^2 + \|u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot) - u_m^0[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)}^2 \right) \quad (3.17)$$

$$\text{sujeto a } \begin{cases} \partial_t u_m^0 - \text{div}(A_m^0 \nabla u_m^0) = f_l \text{ en } Q \\ u_m^0 = 0 \text{ sobre } \Sigma \\ u_m^0(t = 0) = u_0 \text{ en } \Omega, \end{cases}$$

El siguiente lema verifica que, como A_σ^ε G -converge a A_σ^0 , el flujo correspondiente converge débilmente.

Lema 3.11 Sea $(A^\varepsilon)_{\varepsilon>0} \subset \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$. Entonces A^ε G -converge a $A^0 \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ ssi $A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon \cdot \nu \rightharpoonup A^0 \nabla u^0 \cdot \nu$ débil en $L^2(0, T; L^2(\partial\Omega))$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$.

Demostración: Si A^ε G -converge a $A^0 \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, por definición, se tiene que para todo $\psi \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$,

$$\int_Q (A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon - A^0 \nabla u^0) \cdot \nabla \psi - \int_Q (\partial_t u^\varepsilon - \partial_t u^0) \psi \rightarrow 0 \text{ cuando } \varepsilon \rightarrow 0.$$

De (3.8), el segundo término converge a 0 cuando $\varepsilon \rightarrow 0$. Así, el primer término también. Integrando por partes este último, se obtiene

$$\int_\Sigma (A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon \cdot \nu - A^0 \nabla u^0 \cdot \nu) \cdot \psi \rightarrow 0 \text{ cuando } \varepsilon \rightarrow 0.$$

Por lo que $A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon \cdot \nu \rightharpoonup A^0 \nabla u^0 \cdot \nu$ débil en $L^2(0, T; L^2(\partial\Omega))$. Para la conversa, basta realizar el razonamiento inverso (a partir del último límite) \square .

El siguiente teorema establece que la G -convergencia entre dos tensores garantiza que el G -límite se alcanza resolviendo el problema de minimización propuesto en (3.17).

Teorema 3.12 Sea A_σ^ε una sucesión de tensores en $\mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$, donde $\sigma \in \mathcal{A}$ tal que A_σ^ε G -converge a $A_\sigma^0 \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$. Ahora, para cada ε , se considera el problema de minimización

$$\min_{m \in \mathcal{A}} \Phi(m),$$

donde

$$\Phi(m) := \sum_{l=1}^{l_0} \left(\|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon[f_l] \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0[f_l] \cdot \nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))}^2 + \|u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot) - u_m^0[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)}^2 \right).$$

Entonces, para toda sucesión minimizante $(m_n^\varepsilon)_n$, existe una subsucesión $(m_{n_k}^\varepsilon)_k$ tal que

$$G \lim_{k \rightarrow \infty} A_{m_{n_k}^\varepsilon}^\varepsilon(x) = A_\sigma^0(x).$$

Además,

$$G \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (G \lim_{k \rightarrow \infty} A_{m_{n_k}^\varepsilon}^\varepsilon(x)) = A_\sigma^0(x)$$

Demostración: Se denota $\bar{\Phi} := \inf_{m \in \mathcal{A}} \Phi(m)$. Como $(m_n^\varepsilon)_n$ es minimizante y Φ es no negativo, sigue que $(\Phi(m_n^\varepsilon))_n$ es uniformemente acotado, es decir,

$$\forall \delta > 0, \exists M = M(\delta) \text{ tal que } 0 \leq \Phi(m_n^\varepsilon) \leq \bar{\Phi} + \delta, \forall n \geq M.$$

Luego, existe una subsucesión $(m_{n_k}^\varepsilon)_k$ tal que $A_{m_{n_k}^\varepsilon}^0 \nabla u_{m_{n_k}^\varepsilon}^0[f_l] \cdot \nu \rightarrow A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon[f_l] \cdot \nu$ débil en $H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))$, y $u_{m_{n_k}^\varepsilon}^0[f_l](\theta, \cdot) \rightarrow u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot)$ débil en $H^3(\Omega)$, para todo $l = 1, \dots, l_0$ cuando $k \rightarrow \infty$. Por el Lema 3.11, se tiene en particular que $A_{m_{n_k}^\varepsilon}^0(x)$ G -converge a $A_\sigma^\varepsilon(x)$ cuando $k \rightarrow \infty$, obteniendo así el primer límite buscado.

Como además $A_\sigma^\varepsilon(x)$ G -converge a $A_\sigma^0(x)$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, se obtiene el segundo límite buscado. \square

El último resultado no implica ningún tipo de convergencia puntual para la solución del problema inverso, pero, por otro lado, asegura que mediante el problema de minimización planteado, se está aproximando (en el sentido del G -convergencia) al tensor que se quiere recuperar. Se define $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$, dado por

$$\Phi(m) := \sum_{l=1}^{l_0} \left(\|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_m^\varepsilon[f_l] \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0[f_l] \cdot \nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))}^2 + \|u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot) - u_m^0[f_l](\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)}^2 \right),$$

y se considera el problema de minimización

$$\bar{\Phi} := \inf_{m \in \mathcal{A}} \Phi(m) \quad (3.18)$$

Antes de continuar, será útil enunciar el siguiente resultado de regularidad interior. Para su demostración, ver [20], Sección 6.3.1.⁴

Teorema 3.13 *Sea $G \in L^2(0, T)$ y $F \in H^1(0, T)$ solución de la ecuación*

$$\partial_{tt}F = G \text{ en } (0, T).$$

Luego, $F \in H_{loc}^1(0, T)$ y para todo abierto compactamente contenido $V \subset\subset (0, T)$, se tiene la estimación

$$\|F\|_{H^2(V)} \leq C(\|G\|_{L^2(0, T)} + \|F\|_{L^2(0, T)}),$$

donde C depende de T y V .

El siguiente lema es, en el contexto del problema parabólico, equivalente al Lema 2.7 para el problema elíptico. Esto es, se establece la existencia de una subsucesión débil convergente a un elemento $\bar{m} \in \mathcal{A}$. Con esto, $\bar{\Phi} = \Phi(\bar{m})$.

Lema 3.14 *Sea A_m^0 tal que se satisfacen las condiciones de regularidad (2.5)-(2.6), $\forall m \in \mathcal{A}$. Sea $(m_n)_n \subset \mathcal{A}$ una sucesión que converge a $m \in \mathcal{A}$ en $L^r(\Omega)$, para $r \geq 1$. Entonces:*

1. *La sucesión $(A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu)_n$ converge a $A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu$ en $L^2(0, T; H^{-1/2}(\partial\Omega))$.*
2. *Si las soluciones $u_m^0, u_{m_n}^0 \in L^2(0, T; H^2(\Omega))$, entonces la convergencia es en $L^2(0, T; L^2(\partial\Omega))$.*
3. *Si las soluciones $u_m^0, u_{m_n}^0 \in H^2(0, T; H^2(\Omega))$, entonces la convergencia es en $H^2(0, T; L^2(\partial\Omega))$.*
4. *Si las soluciones $u_m^0, u_{m_n}^0 \in L^2(0, T; H^3(\Omega))$, entonces $u_{m_n}^0(\theta, \cdot)$ converge a $u_m^0(\theta, \cdot)$ en $H^3(\Omega)$.*

Demostración: De la formulación variacional del problema (3.6) asociado a m y los $(m_n)_n$, se tiene que

$$\int_Q (\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0) v + \int_Q (A_m^0 \nabla u_m^0 - A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0) \cdot \nabla v = 0, \forall v \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega)).$$

⁴Para efectos de esta tesis, bastará enunciar una versión simplificada.

Sumando el término $\int_Q A_{m_n}^0 \nabla u_m^0 \cdot \nabla v$, se obtiene

$$\int_Q (\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0) v + \int_Q A_{m_n}^0 (\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0) \cdot \nabla v = \int_Q (A_{m_n}^0 - A_m^0) \nabla u_m^0 \cdot \nabla v.$$

Elijiendo $v = u_m^0 - u_{m_n}^0 \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$, y por desigualdad de Hölder, se tiene que

$$\begin{aligned} \|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)}^2 &\leq C \|A_{m_n}^0 - A_m^0\|_{L^p(Q)} \|\nabla u_m^0\|_{L^q(Q)} \|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)} \\ &\quad + C \|\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0\|_{L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))} \|u_m^0 - u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)} \\ &\leq C \|A_{m_n}^0 - A_m^0\|_{L^p(Q)} \|\nabla u_m^0\|_{L^q(Q)} \|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)} \\ &\quad + C \|\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0\|_{L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))} \|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde $1/q + 1/p = 1/2$. En la última línea se utilizó la desigualdad de Poincaré. Luego, simplificando el término $\|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)} &\leq C \|A_{m_n}^0 - A_m^0\|_{L^p(Q)} \|\nabla u_m^0\|_{L^q(Q)} \\ &\quad + C \|\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0\|_{L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

Notar que, utilizando la estimación (3.3) con $l = 1, m_0 = 0$, se tiene que

$$\|\nabla u_m^0\|_{L^q(Q)} \leq C \|u_m^0\|_{C(0, T; L^2(\Omega))} \leq C (\|u_0\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{W^{1,1}(0, T; L^2(\omega))}). \quad (3.21)$$

Así, utilizando la desigualdad (3.21) en (3.20), se obtiene

$$\begin{aligned} \|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)} &\leq C \|A_{m_n}^0 - A_m^0\|_{L^p(Q)} (\|u_0\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{W^{1,1}(0, T; L^2(\omega))}) \\ &\quad + C \|\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0\|_{L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))} \\ &\leq C (\|m_n - m\|_{L^p(Q)} + \|\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0\|_{L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))}). \end{aligned} \quad (3.22)$$

En la segunda línea de estas desigualdades se utilizó el Teorema del Valor Medio para los tensores A_m^0 y $A_{m_n}^0$ junto con 2.5. Se recuerda que C denota una constante genérica que cambia en cada desigualdad, esto es, absorbe otras constantes en el desarrollo de las desigualdades, y puede depender de u_0, f, Q, \mathcal{A} , entre otras variables. Lo relevante es que C no depende de m ni m_n .

Se define ahora $w := A_m^0 \nabla u_m^0 - A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0$. Se tiene que

$$\|w\|_{L^2(Q)}^2 = \int_Q |w|^2 = \int_Q A_{m_n}^0 (\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0) \cdot w + \int_Q (A_m^0 - A_{m_n}^0) \nabla u_m^0 \cdot w.$$

Luego, por desigualdad de Hölder,

$$\|w\|_{L^2(Q)}^2 \leq \left(C \|\nabla u_m^0 - \nabla u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)} + \|A_m^0 - A_{m_n}^0\|_{L^p(Q)} \|\nabla u_m^0\|_{L^q(Q)} \right) \|w\|_{L^2(Q)}.$$

Simplificando el término $\|w\|_{L^2(Q)}$, utilizando el Teorema del Valor Medio sobre los tensores, y las desigualdades (3.21) y (3.22), se obtiene

$$\begin{aligned} \|w\|_{L^2(Q)} &\leq C \|m_n - m\|_{L^p(\Omega)} + C \|\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)} \\ &\quad + \|m_n - m\|_{L^p(\Omega)} (\|u_0\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{W^{1,1}(0, T; L^2(\omega))}) \\ &\leq C (\|m_n - m\|_{L^p(\Omega)} + \|\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0\|_{L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))}). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Notar que $w \in L^2(0, T; H(\operatorname{div}; \Omega))$. En efecto, $\operatorname{div}(w) = \partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0 \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$. Luego, como el mapeo $w \in L^2(0, T; H(\operatorname{div}; \Omega)) \mapsto w \cdot \nu \in L^2(0, T; H^{-1/2}(\partial\Omega))$ es continuo, entonces

$$\begin{aligned} \|A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu - A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu\|_{L^2(0, T; H^{-1/2}(\partial\Omega))} &\leq C(\|w\|_{L^2(Q)} + \|\operatorname{div}(w)\|_{L^2(Q)}) \\ &= C(\|w\|_{L^2(Q)} + \|\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0\|_{L^2(Q)}) \\ &\leq C\|m_n - m\|_{L^p(\Omega)} \\ &\quad + C\|\partial_t u_m^0 - \partial_t u_{m_n}^0\|_{L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

donde en la última línea se utilizó la desigualdad (3.23). Por el mismo argumento de débil*-compacidad utilizado en (3.8) para la familia $(u_{m_n})_n$ en V , con V definido en (3.7), se tiene que $\partial_t u_{m_n}^0 \rightharpoonup \partial_t u_m^0$ débil* en $L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$, salvo subsucesiones. Con esto, el segundo término del lado derecho de esta desigualdad converge a 0 cuando $n \rightarrow \infty$. Para ver que el primer término converja a 0, se deben considerar dos casos. Primero, si $p \geq r$, entonces es directo. Si no, se puede usar el hecho de que \mathcal{A} es acotado en $L^\infty(\Omega)$, con lo que

$$\int_{\Omega} |m|^p \leq \lambda^{r-p} \int_{\Omega} |m|^r,$$

con lo que también se tiene que $m_n \rightarrow m$ en $L^p(\Omega)$, y se obtiene el primer resultado buscado.

Si además $u_m^0, u_{m_n}^0 \in L^2(0, T; H^2(\Omega))$, entonces la sucesión $(A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0)_n$ es uniformemente acotada en $(L^2(0, T; H^1(\Omega)))^d$. Luego, existe una subsucesión $(A_{m_{n'}}^0 \nabla u_{m_{n'}}^0)_{m_{n'}}$ tal que

$$A_{m_{n'}}^0 \nabla u_{m_{n'}}^0 \rightharpoonup \xi \text{ débil en } (L^2(0, T; H^1(\Omega)))^d,$$

para algún $\xi \in \mathbb{R}^d$. Con esto,

$$A_{m_{n'}}^0 \nabla u_{m_{n'}}^0 \rightarrow \xi \text{ fuerte en } (L^2(0, T; L^2(\Omega)))^d.$$

Pero, por la desigualdad (3.23), todas las subsucesiones convergen al mismo límite. Luego,

$$A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \rightharpoonup A_m^0 \nabla u_m^0 \text{ débil en } (L^2(0, T; H^1(\Omega)))^d.$$

Esto, junto con la segunda línea en (3.24), implica que

$$A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu \rightharpoonup A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu \text{ débil en } L^2(0, T; H^{1/2}(\partial\Omega)).$$

Gracias a la inyección compacta entre $L^2(0, T; H^{1/2}(\partial\Omega)) \subset L^2(0, T; L^2(\partial\Omega))$, se obtiene finalmente que

$$A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu \rightarrow A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu \text{ fuerte en } L^2(0, T; L^2(\partial\Omega)).$$

Con esto, se tiene la convergencia de los flujos en $L^2(0, T; L^2(\partial\Omega))$, obteniendo así el segundo resultado buscado. Para ver la convergencia en $H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))$, se define $G_{m_n} : (0, T) \times \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$, dado por

$$G(t, x) := \partial_{tt} A_{m_n}(x) \nabla u_{m_n}^0(t, x) \cdot \nu(x).$$

La familia $(G_{m_n})_n$ está uniformemente acotada en $L^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\partial\Omega))$. En efecto, para todo $n \in \mathbb{N}$ se tiene que

$$\begin{aligned} \|G_{m_n}\|_{L^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\partial\Omega))} &= \|\partial_{tt} A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu\|_{L^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\partial\Omega))} \\ &\leq C \|\partial_{tt} \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu\|_{L^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\partial\Omega))} \\ &\leq C \|u_{m_n}^0\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; H^{1/2}(\partial\Omega))} \\ &\leq C \|u_{m_n}^0\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; H^1(\Omega))} \\ &\leq C \|u_{m_n}^0\|_{C^2(\tau_1, \tau_2; H^1(\Omega))} \\ &\leq C (\|u_0\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{W^{2,1}(0, T; H^1(\omega))}). \end{aligned}$$

En la tercera desigualdad, se utilizó la desigualdad de la traza, en la cuarta, se utilizó la inyección continua $H^2(\tau_1, \tau_2; H^1(\Omega)) \subset C^2(\tau_1, \tau_2; H^1(\Omega))$, y en la última desigualdad se utilizó la estimación (3.3) con $l = 2$ y $m_0 = 1$. Luego, aplicando el Teorema 3.13 para $V = (\tau_1, \tau_2)$, se tiene la estimación

$$\|A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu\|_{H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\partial\Omega))} \leq C (\|G_{m_n}\|_{L^2(0, T; L^2(\partial\Omega))} + \|A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu\|_{L^2(0, T; L^2(\Gamma_0))}).$$

El primer término del lado derecho, como se vio recién, está acotado uniformemente. Ya se estableció la convergencia del segundo anteriormente, por lo que, en particular, está acotado. Con esto, la sucesión $(A_{m_n}^0 \nabla u_{m_n}^0 \cdot \nu)_n$ está acotada uniformemente en $H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\partial\Omega))$, por lo que existe una subsucesión convergente en $H^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\partial\Omega))$. En particular, la subsucesión converge en $L^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\partial\Omega))$ que, como se vio anteriormente, es a $A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu$ cuando $n \rightarrow \infty$. Con esto, se obtiene la tercera convergencia buscada.

Si además las soluciones satisfacen $u_m^0, u_{m_n}^0 \in L^2(0, T; H^3(\Omega))$, entonces, se tiene que

$$\begin{aligned} \|u_{m_n}^0(\theta, \cdot)\|_{H^3(\Omega)} &\leq C \|u_{m_n}^0\|_{L^2(0, T; H^3(\Omega))} \\ &\leq C \|u_{m_n}^0\|_{C^0(0, T; H^3(\Omega))} \\ &\leq C (\|u_0\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{L^2(0, T; H^3(\omega))}) \end{aligned}$$

donde en la última línea se utilizó la estimación (3.3) con $l = 0, m_0 = 3$. Con esto, la familia $(u_{m_n}^0(\theta, \cdot))_n$ es uniformemente acotada en $H^3(\Omega)$, y por lo tanto, débil-compacta en $H^3(\Omega)$, por lo que existe una subsucesión $(u_{m_{n'}}^0(\theta, \cdot))_{n'}$ convergente a cierto $v \in H^3(\Omega)$ cuando $n' \rightarrow \infty$. Sólo falta ver que $v = u_m^0(\theta, \cdot)$. Primero, notar que, en particular, $u_{m_{n'}}$ converge a v en $H^1(\Omega)$. Por otro lado,

$$\begin{aligned} \|u_{m_n}^0(\theta, \cdot) - u_m^0(\theta, \cdot)\|_{H^1(\Omega)} &\leq C \|u_{m_n}^0 - u_m^0\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))} \\ &\leq C \|\nabla u_{m_n}^0 - \nabla u_m^0\|_{L^2(Q)}, \end{aligned}$$

donde en la última línea se utilizó la desigualdad de Poincaré. Con esta desigualdad, sumado a la desigualdad (3.22), y del hecho de que el lado derecho de esta última converge a 0 cuando $n \rightarrow \infty$ ⁵, se tiene que $u_{m_n}^0(\theta, \cdot)$ converge a $u_m^0(\theta, \cdot)$ en $H^1(\Omega)$. Para que esto ocurra, necesariamente $v = u_m^0(\theta, \cdot)$, obteniendo así la última convergencia buscada, con lo que se concluye. \square

Observación 3.15 *El mismo análisis es válido si se considera $\Gamma_0 \subset \Omega$ en lugar de $\partial\Omega$, por lo que el resultado es relevante para la definición de Φ .*

⁵La convergencia de m_n a m en el caso $p \geq r$ es directa. Para el caso $p \leq r$ se utiliza el mismo argumento del Lema 2.7. La convergencia de $\partial_t u_{m_n}^0$ en $\partial_t u_m^0$ es salvo subsucesiones.

3.1.4. Regularización de Tikhonov

Por los mismos motivos dados en el problema elíptico, se elige resolver el problema de minimización regularizado definido por

$$\bar{\Psi} = \inf_{m \in \mathcal{A}} \Psi(m) := \Phi(m) + \gamma R(m), \quad (3.25)$$

donde $\gamma > 0$ y $R(m) = \|m\|_{H^1(\Omega)}^2$. El siguiente teorema es equivalente al Teorema 2.9, pero en el contexto del problema parabólico. La demostración, como se verá, es prácticamente la misma⁶.

Teorema 3.16 Sean $u^0 \in L^2(\tau_1, \tau_2; H^2(\Omega))$ y $(m_n)_n$ una sucesión minimizante de (3.25). Luego, la sucesión contiene una subsucesión que converge débilmente en $H^1(\Omega)$ a cierto $\bar{m} \in \mathcal{A}$, que alcanza el ínfimo, esto es, $\bar{\Psi} = \Psi(\bar{m})$.

Demostración: En el Teorema 3.12 ya se establece la continuidad débil de Φ . Por la no-negatividad de Φ y del hecho de que la sucesión $(m_n)_n$ es minimizante, sigue que la sucesión $(\gamma \|m_n\|_{H^1(\Omega)})^2$ es uniformemente acotada, esto es, para todo $\delta > 0$, existe $M = M(\delta)$ tal que

$$\gamma \|m_n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \bar{\Phi} + \delta, \forall n \geq M.$$

Luego, existe una subsucesión $(m_{n_k})_k$ que converge débilmente en $H^1(\Omega)$ a cierto $\bar{m} \in \mathcal{A}$. Como $u^0 \in H^2(\Omega)$, por el Lema 3.14, junto con la semicontinuidad inferior débil de R , se tiene entonces semicontinuidad inferior débil de Ψ . Luego,

$$\Psi(\bar{m}) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \Psi(m_n) \leq \bar{\Psi}.$$

Además, por definición, $\Psi(\bar{m}) \geq \bar{\Psi}$, por lo que se tiene la igualdad. \square

3.2. Análisis numérico

3.2.1. Discretización Espacial

Para esta sección, se procederá como en la Sección 2.2. Esto es, se considera el método FE-HMM, con espacio de elementos finitos macroscópico $S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H)$ y microscópico $S_0^g(K_{\delta_j}, \mathcal{T}_h)$ definidos en (1.1) y (1.4) respectivamente, así como las fórmulas de cuadratura (1.2) y (1.3). También se considerará el problema microscópico discreto (2.16).

El método numérico para el problema directo homogeneizado se define como sigue: Encontrar $u^{0,H} : [0, T] \times S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H) \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$\begin{aligned} (\partial_t u^{0,H}(t), v^H) + B_H^0(u^{0,H}(t), v^H) &= (f(t), v^H), \forall v^H \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H), t \in (0, T) \\ u^{0,H}(t=0) &= u_0^H \text{ en } \Omega, \end{aligned} \quad (3.26)$$

⁶La única diferencia está en los resultados previos que se utilizan y los espacios.

donde B_H^0 es la forma bilineal definida en (2.18) y $u_0^H \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H)$ es una aproximación de u_0 . Además, $u_{K_j}^h$ y $v_{K_j}^h$ son las soluciones de los problemas microscópicos (2.16). Se consideran las mismas hipótesis para las fórmulas de cuadratura (1.2) y (1.3) para la discretización espacial. Será útil la siguiente construcción para el tensor homogeneizado numérico: Sea $(\mathbf{e})_{i=1}^d$ la base canónica de \mathbb{R}^d . Para cada \mathbf{e}_i , se consideran los siguientes problemas elípticos:

$$\int_{K_{\delta_j}} A^\varepsilon(x) \nabla \psi_{K_j}^i(x) \cdot \nabla z(x) dx = - \int_{K_{\delta_j}} A^\varepsilon(x) \mathbf{e}_i \cdot \nabla z(x) dx, \forall z \in W(K_{\delta_j}), \quad (3.27)$$

$$\int_{K_{\delta_j}} A^\varepsilon(x) \nabla \psi_{K_j}^{i,h}(x) \cdot \nabla z^h(x) dx = - \int_{K_{\delta_j}} A^\varepsilon(x) \mathbf{e}_i \cdot \nabla z^h(x) dx, \forall z^h \in S^q(K_{\delta_j}, \mathcal{T}_H), \quad (3.28)$$

donde $W(K_{\delta_j})$ fue definido en (1.5) y (1.6). Se definen los tensores homogeneizados

$$\begin{aligned} A_K^0(x_{K_j}) &:= \frac{1}{|K_{\delta_j}|} \int_{K_{\delta_j}} A^\varepsilon(x) \left(I + J_{\psi_{K_j}^h(x)}^T \right) dx \\ \bar{A}_K^0(x_{K_j}) &:= \frac{1}{|K_{\delta_j}|} \int_{K_{\delta_j}} A^\varepsilon(x) \left(I + J_{\psi_{K_j}(x)}^T \right) dx \end{aligned} \quad (3.29)$$

y donde $\psi_{K_j}^i$ (resp. $\psi_{K_j}^{i,h}$) es la solución del problema (3.27) (resp. (3.28)), $J_{\psi_{K_j}(x)}$ (resp. $J_{\psi_{K_j}^h(x)}$) es la matriz de $d \times d$ cuyas entradas son $(J_{\psi_{K_j}(x)})_{ik} = \partial \psi_{K_j}^i / \partial x_k$ (resp. $(J_{\psi_{K_j}^h(x)})_{ik} = \partial \psi_{K_j}^{i,h} / \partial x_k$).

Para ver resultados de convergencia expuestos en [5] del método numérico, se consideran las siguientes hipótesis:⁷

- El tensor homogeneizado A^0 satisface

$$a_{ij}^0 \in C^0(\bar{K}), \text{ para todo } K \in \mathcal{T}_H, i, j = 1, \dots, d. \quad (3.30)$$

- Sea $\psi_{K_j}^i$ es solución del problema micro (2.16). Entonces

$$\|\psi_{K_j}^i\|_{H^{q+1}(K_{\delta_j})} \leq C \varepsilon^{-q} \sqrt{|K_{\delta_j}|}, \quad (3.31)$$

donde C es independiente de ε, x_{K_j} y K_{δ_j} .

Observación 3.17 *Por ejemplo, para $q = 1$, esta condición se satisface fácilmente sin conocer la estructura del tensor oscilatorio A^ε . En efecto, la estimación $\|\psi_{K_j}^i\|_{H^2(K_{\delta_j})} \leq C \varepsilon^{-1} \sqrt{|K_{\delta_j}|}$, sigue de resultados clásicos de regularidad en H^2 (ver, por ejemplo, [28], Capítulo 2.6) si $\|a_{ij}^\varepsilon\|_{W^{1,\infty}} C \varepsilon^{-1} \sqrt{|K_{\delta_j}|}$.*

⁷Los resultados originales en dicho artículo consideran que el tensor puede depender del tiempo, que no es el caso de interés en esta tesis. Por esto, en el presente trabajo las hipótesis sobre la variable temporal se ignoran.

Definición 3.18 Se definen los errores r_{HMM} y r_{MOD} como

$$\begin{aligned} r_{HMM} &:= \sup_{K \in \mathcal{T}_H, x_{K_j} \in K} \|A^0(x_{K_j}) - A_K^0(x_{K_j})\|_F, \\ r_{MOD} &:= \sup_{K \in \mathcal{T}_H, x_{K_j} \in K} \|A^0(x_{K_j}) - \bar{A}_K^0(x_{K_j})\|_F, \end{aligned} \quad (3.32)$$

donde $\|\cdot\|_F$ es la norma de Frobenius dada por $\|M\|_F = \sqrt{\text{traza}(M^T M)}$, para una matriz M .

Observación: r_{HMM} representa el error de modelamiento o error microscópico, esto es, el error dado por un posible desajuste al promediar en el método *FE-HMM*, las condiciones de borde, el tamaño de los dominios de muestreo y el error de la discretización de elementos finitos en escala microscópica.

Los siguientes teoremas establecen la convergencia del método numérico (3.26).

Teorema 3.19 (Teorema 4.1 en [5]): Sean $u^0, u^{0,H}$ soluciones de (3.6) y (3.26) respectivamente. Sean $\mu = 0$ ó 1 , $l \geq 1$, $2 \leq p \leq \infty$ tal que $l > d/p$. Suponiendo que se satisfacen las fórmulas de cuadratura (1.2) y (1.3), la hipótesis (3.30), coercitividad y continuidad del operador bilineal B_H^0 y que

$$\begin{aligned} u^0, \partial_t u^0 &\in L^2(0, T; W^{l+1, p}(\Omega)) \\ a_{ij}^0 &\in W^{l+\mu, \infty}(\Omega), \end{aligned}$$

entonces se tienen las siguientes estimaciones:

$$\begin{aligned} \|u^0 - u^{0,H}\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))} &\leq C(H^l + r_{HMM} + \|u_0 - u_0^H\|_{L^2(\Omega)}) \\ \|u^0 - u^{0,H}\|_{C^0(0, T; L^2(\Omega))} &\leq C(H^{l+1} + r_{HMM} + \|u_0 - u_0^H\|_{L^2(\Omega)}), \quad \text{si } \mu = 1, \end{aligned} \quad (3.33)$$

Si además el tensor es simétrico, entonces se tiene la siguiente estimación:

$$\|u^0 - u^{0,H}\|_{C^0(0, T; H^1(\Omega))} \leq C(H^l + r_{HMM} + \|u_0 - u_0^H\|_{H^1(\Omega)}).$$

Las constantes C son independientes de H y r_{HMM} .

Teorema 3.20 (Teorema 4.3 en [5]). Bajo las mismas hipótesis del Teorema 3.19, además de la hipótesis (3.31), se tienen las siguientes estimaciones:

$$\begin{aligned} \|u^0 - u^{0,H}\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))} &\leq C(H^l + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + r_{MOD} + \|u_0 - u_0^H\|_{L^2(\Omega)}) \\ \|u^0 - u^{0,H}\|_{C^0(0, T; L^2(\Omega))} &\leq C(H^{l+1} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + r_{MOD} + \|u_0 - u_0^H\|_{L^2(\Omega)}). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Las constantes C son independientes de H, h, r_{MOD} y ε .

Teorema 3.21 (Teorema 4.4 en [5]) Se consideran las mismas hipótesis del Teorema 3.20. Si $\psi_{K_{\delta_j}}^i$ es la solución del problema celda (3.28) en el espacio $W_{per}^1(K_{\delta_j})$, $\varepsilon/\delta \in \mathbb{N}$ y el tensor $A^\varepsilon(x) = A(x, x/\varepsilon) = A(x, y)$ es Y -periódico en y , donde $Y = (0, 1)^d$ y además es evaluado

en los puntos de cuadratura x_{K_j} en la forma bilineal macroscópica B_H^0 definida en (2.18) y en el problema microscópico (2.16) dadas por FE-HMM, entonces

$$\begin{aligned} \|u^0 - u^{0,H}\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} &\leq C(H^l + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + \|u_0 - u_0^H\|_{L^2(\Omega)}) \\ \|u^0 - u^{0,H}\|_{C^0(0,T;L^2(\Omega))} &\leq C(H^{l+1} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + \|u_0 - u_0^H\|_{L^2(\Omega)}). \end{aligned}$$

Si el tensor es simétrico, entonces

$$\|u^0 - u^{0,H}\|_{C^0(0,T;H^1(\Omega))} \leq C(H^l + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + \|u_0 - u_0^H\|_{H^1(\Omega)}).$$

Todas las constantes C son independientes de H, h y ε .

3.2.2. Aproximación de flujos en la frontera

Del problema homogeneizado (3.6), se puede probar que para $v \in H^1(\Omega)$ y $t \in (0, T)$,

$$\int_{\partial\Omega} (A^0 \nabla u^0(t) \cdot \nu) v = \int_{\Omega} \partial_t u^0(t) v + \int_{\Omega} A^0 \nabla u^0(t) \cdot \nabla v - \int_{\Omega} f(t) v,$$

lo que corresponde a una formulación débil del flujo homogeneizado $A^0 \nabla u^0 \cdot \nu$ en cada tiempo $t \in (0, T)$. Al igual que en la discretización del problema elíptico, se supone que Ω es un polígono y se consideran los siguientes subespacios de $S^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$:

$$\begin{aligned} S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H) &= \{v^H \in S^1(\Omega, \mathcal{T}_H) : v^H = 0 \text{ en las esquinas de } \Omega\} \\ S_i^1(\Omega, \mathcal{T}_H) &= \{v^H \in S^1(\Omega, \mathcal{T}_H) : v^H = 0 \text{ en los nodos internos de } \Omega\}. \end{aligned}$$

Además, se define $S_c^1(\partial\Omega, \mathcal{T}_H)$ como el espacio de dimensión finita de las funciones en el espacio $S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$ restringidas a $\partial\Omega$.

Suponiendo $u^{0,H}$ conocida, se busca aproximar el flujo sobre $\partial\Omega$. Sean Γ_j , $j = 1, \dots, n$ las interfaces rectas que definen a $\partial\Omega$. Sean $X_j(\Omega, \mathcal{T}_H)$, $j = 1, \dots, n$ las fibras de los elementos en \mathcal{T}_H que tienen al menos un vértice en Γ_j .

Un flujo aproximado puede construirse progresivamente para cada interfaz en la frontera, al ensamblar funciones en $S_c^1(\Gamma_j, \mathcal{T}_H)$, para $j = 1, \dots, n$, de manera que

$$\int_{\partial\Omega} A^{0,H} \nabla u^{0,H}(t) \cdot \nu v = \int_{\Omega} \partial_t u^{0,H}(t) v^H + B_H^0(u^{0,H}(t), v^H) - \int_{\Omega} f(t) v^H \quad (3.35)$$

Para todo $t \in (0, T)$ y $v^H \in S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H) \cap S_i^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$, con $v^H = 0$ sobre $\partial\Omega \setminus \Gamma_j$.

Así, reconstruir el flujo $A^{0,H} \nabla u^{0,H}(t) \cdot \nu$ en cada tiempo t lleva a resolver el sistema lineal cuyas incógnitas son los valores de $A^{0,H} \nabla u^{0,H} \cdot \nu$ en los nodos de la frontera.

El siguiente lema será de utilidad.

Lema 3.22 (Lema 5.1 en [5]) Sea $\mu = 0$ o 1 , $l \geq 1$ y $2 \leq p \leq \infty$ tal que $l > d/p$. Se suponen ciertas las hipótesis (1.2) y (1.3). Además,

$$\begin{aligned} u^0, \partial_t u^0 &\in L^2(0, T; W^{l+1, p}(\Omega)) \\ a_{ij}^0 &\in W^{l+\mu, \infty}(\Omega), \forall i, j = 1, \dots, d \\ a_{ij}^0 &\in C^0(\bar{K}), \forall K \in \mathcal{T}_H, i, j = 1, \dots, d \end{aligned}$$

Luego, se tiene que

$$\|\partial_t^k(u^0 - u^{0,H})\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))} \leq C(H^{l+\mu} + r_{HMM}), k = 0, 1, \mu = 0, 1.$$

Con esto, se puede probar el siguiente teorema:

Teorema 3.23 Sea una familia de triangulaciones macroscópicas cuasi-uniformes $\{\mathcal{T}_H\}_{H>0}$. Se supone que el acoplamiento entre las mallas macro-micro siguen la relación $H = \mathcal{O}(h/\varepsilon)$, y el error de modelamiento microscópico con la malla macroscópica sigue una relación $r_{HMM} = \mathcal{O}(H^k)$, para algún $k \geq 1$. Sea u^0 solución del problema homogeneizado en $H^1(0, T; H^3(\Omega))$ y $a_{ij}^0 \in W^{2, \infty}(\Omega)$. Se suponen además las hipótesis del Lema 3.22. Entonces el flujo aproximado $A^{0,H} \nabla u^{0,H} \cdot \nu$ satisface:

$$\|A^0 \nabla u^0 \cdot \nu - A^{0,H} \nabla u^{0,H} \cdot \nu\|_{L^2(0, T; L^2(\partial\Omega))} \leq C\left(H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{3/2} + H^{l+\mu-1/2} + H^{k-1/2}\right)$$

Demostración: La demostración es, en gran medida, una extensión de la demostración Teorema 2.12, agregando la variable temporal. Para $t \in [0, T]$, $v^H \in S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H) \cap S_i^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$, con $v^H = 0$ en $\partial\Omega \setminus \Gamma_j$, se tiene que

$$\begin{aligned} (A^0 \nabla u^0(t) \cdot \nu - A^{0,H} \nabla u^{0,H}(t) \cdot \nu, v^H)_{L^2(\partial\Omega)} &= B(u^0(t), v^H) - B_H(u^{0,H}(t), v^H) \\ &\quad + \int_{\Omega} (\partial_t u^0(t) - \partial_t u^{0,H}(t)) v^H \end{aligned}$$

Se definen ahora las formas bilineales

$$\begin{aligned} \tilde{B}_H(v^H, w^H) &:= \sum_{k \in \mathcal{T}_H} |K| \int_K A^0(x_k) \nabla v_K^H \cdot \nabla w_K^H \\ \bar{B}_H(v^H, w^H) &:= \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \frac{|K|}{|K_\delta|} \int_{K_\delta} A^\varepsilon \nabla v_K \cdot \nabla w_K, \end{aligned} \tag{3.36}$$

donde v_K, w_K son las soluciones exactas del problema microscópico (2.16) en el espacio de funciones $W(K_\delta)$. Luego,

$$\begin{aligned} (A^0 \nabla u^0(t) - A^{H,0} \nabla u^{0,H}(t) \cdot \nu, v^H)_{L^2(\partial\Omega)} &\leq |B(u^0(t), v^H) - \tilde{B}_H(\Pi^H u^0(t), v^H)| \\ &\quad + |\tilde{B}_H(\Pi^H u^0(t), v^H) - \bar{B}_H(u^{0,H}(t), v^H)| \\ &\quad + |\bar{B}_H(u^{0,H}(t), v^H) - B_H(u^{0,H}(t), v^H)| \\ &\quad + \int_{\Omega} |\partial_t(u^0(t) - u^{0,H}(t)) v^H| \\ &:= I_1 + I_2 + I_3 + I_4, \end{aligned}$$

donde Π^H sorresponde al operador de interpolación. De [38], se tiene que

$$I_1 \leq CH^2(\|u^0\|_{H^3(\Omega)} + \|f\|_{H^2(\Omega)})\|\nabla v^H\|_{L^2(X_j)},$$

Por otro lado, se tiene (ver [1, 2]) que

$$I_3 \leq C\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^2\|\nabla u^{0,H}\|_{L^2(X_j)}\|\nabla v^H\|_{L^2(X_j)},$$

donde C no depende de δ ni x_K . El término I_2 captura un error de modelamiento, que se anula suponiendo que el tensor localmente periódico admite separación explícita entre variables lentas y rápidas. Así, gracias al Lema 2.10, se tiene que

$$(A^0\nabla u^0 \cdot \nu - A^{0,H}\nabla u^{0,H} \cdot \nu, v^H)_{L^2(\partial\Omega)} \leq C\left(H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^2 H^{-1/2}\right)\|v^H\|_{L^2(\partial\Omega)} + I_4.$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} I_4 &= \int_{\Omega} |\partial_t(u^0(t) - u^{0,H}(t))| |v^H| \\ &\leq \|\partial_t(u^0(t) - u^{0,H}(t))\|_{L^2(\Omega)} \|v^H\|_{L^2(\Omega)} \\ &= \|\partial_t(u^0(t) - u^{0,H}(t))\|_{L^2(\Omega)} \|v^H\|_{L^2(X_j)} \end{aligned}$$

Luego, tomando

$$v^H = \begin{cases} \Pi^H(A^0\nabla u^0(t) \cdot \nu) - A^{0,H}\nabla u^{0,H}(t) \cdot \nu & \text{sobre } \Gamma_j \\ 0 & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \Gamma_j \end{cases}$$

y tal que $\int_{X_j} v^H = 0$, se tiene, por la desigualdad de Poincaré–Wirtinger, y el Lema 2.10, que

$$\begin{aligned} I_4 &\leq C\|\partial_t(u^0(t) - u^{0,H}(t))\|_{L^2(\Omega)}\|\nabla v^H\|_{L^2(X_j)} \\ &\leq CH^{-1/2}\|\partial_t(u^0(t) - u^{0,H}(t))\|_{L^2(\Omega)}\|\Pi^H(A^0\nabla u^0(t) \cdot \nu) - A^{0,H}\nabla u^{0,H}(t) \cdot \nu\|_{L^2(\Gamma_j)} \end{aligned}$$

Luego, utilizando el Lema 2.11, resulta

$$\|A^0\nabla u^0(t) \cdot \nu - A^{0,H}\nabla u^{0,H}(t) \cdot \nu\|_{L^2(\Gamma_j)} \leq C\left(H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^2 H^{-1/2} + H^{-1/2}\|\partial_t(u^0(t) - u^{0,H}(t))\|_{L^2(\Omega)}\right) \quad (3.37)$$

Tomando norma en $L^2([0, T])$ y utilizando el Lema 3.22, se obtiene

$$\|A^0\nabla u^0 \cdot \nu - A^{0,H}\nabla u^{0,H} \cdot \nu\|_{L^2(0,T;L^2(\Gamma_j))} \leq C\left(H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^2 H^{-1/2} + H^{l+\mu-1/2} + H^{-1/2}r_{HMM}\right)$$

Como además $H = \mathcal{O}(h/\varepsilon)$ y $r_{HMM} = \mathcal{O}(H^k)$ se obtiene finalmente

$$\|A^0\nabla u^0 \cdot \nu - A^{0,H}\nabla u^{0,H} \cdot \nu\|_{L^2(0,T;L^2(\Gamma_j))} \leq C\left(H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{3/2} + H^{l+\mu-1/2} + H^{k-1/2}\right).$$

Esto es cierto para cada $j = 1, \dots, n$. Sumando sobre j , se obtiene el resultado deseado. \square

3.2.3. Discretización temporal

Para la discretización temporal, se procederá como en [5]. Sea U el vector columnas de los coeficientes de la solución $u^{0,H}$ sobre la base $(\phi_i)_{i=1}^{N_0}$ de $S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H)$. Se denotará por K a la matriz de *stiffness* dada por

$$K = (B_H^0(\phi_i, \phi_j))_{i,j=1}^{N_0}$$

Además, se define la matriz $M := ((\phi_i, \phi_j))_{i,j=1}^{N_0}$. Con esto, el problema (3.46) se puede reescribir como el problema de Cauchy

$$\begin{aligned} MU'(t) + KU(t) &= F(t) \\ U(0) &= U_0, \end{aligned}$$

donde $F(t)$ es el vector que discretiza al término fuente $f(t)$. Otra manera de reescribir (3.46) es utilizando la notación

$$\begin{aligned} U'(t) &= G(t, U(t)) \\ U(0) &= U_0, \end{aligned} \tag{3.38}$$

donde $G(t, U(t)) = -M^{-1}KU(t) + M^{-1}F(t)$. La discretización completa (tiempo y espacio) del problema (3.46) corresponde a una discretización temporal de (3.38) mediante una discretización de Runge-Kutta:

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s b_j S_{nj} \\ U_{ni} &= U_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s \gamma_{ij} S_{nj}, \end{aligned} \tag{3.39}$$

donde $S_{ni} = G(t_n + c_i \Delta t_n, U_{ni})$, b_j , c_i y γ_{ij} , son los coeficientes del método, con $c_i = \sum_{j=1}^s \gamma_{ij}$ para $i, j = 1, \dots, s$ y $t_n = \sum_{i=0}^n \Delta t_i$. El método es de orden r si se cumple el siguiente error luego de un paso para una misma condición inicial entre la solución exacta y la discretizada:

$$U_1 - U(t_1) \rightarrow \mathcal{O}(\Delta t^{r+1}), \text{ cuando } \Delta t \rightarrow 0,$$

para toda condición inicial suficientemente suave. Para el análisis, en [5] se consideran dos clases de métodos para aproximar las integrales: Métodos implícitos y de Chebyshev⁸. El siguiente resultado considera métodos implícitos, más específicamente, de pasos de tiempos variables $(\Delta t_n)_{n=0}^{N_0-1}$, donde $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n > 0$ y $t_{N_0} = T$ que satisfacen, para ciertos $C, c > 0$,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N_0-1} |\Delta t_{n+1}/\Delta t_n - 1| &\leq C, \\ c\Delta t &\leq \Delta t_n \leq \Delta t, \forall n = 0, \dots, N_0 - 1. \end{aligned} \tag{3.40}$$

Otra suposición de utilidad es que la condición inicial numérica u_0^H de FE-HMM aproxima a la condición inicial u_0 bajo las siguientes estimaciones:

$$\begin{aligned} \|u_0^H - u_0\|_{L^2(\Omega)} &\leq C(H^{l+1} + r_{HMM}), \\ \|u_0^H - u_0\|_{H^1(\Omega)} &\leq C(H^l + r_{HMM}). \end{aligned} \tag{3.41}$$

⁸Para efectos de esta tesis, bastará el primero

Esta condición se satisface, por ejemplo, si se escoge u_0^H como la proyección en $L^2(\Omega)$ de u_0 sobre $S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H)$ y, con esta elección, las estimaciones en (3.41) se satisfacen sin el término r_{HMM} .

El siguiente resultado establece convergencia de las soluciones bajo el método numérico incluyendo la discretización temporal.

Teorema 3.24 (Teorema 4.7 en [5]) *Sea $u_n^{0,H}$ la solución numérica de un método de Runge-Kutta para (3.38) con pasos de tiempos variables $(\Delta t_n)_{n=0}^{N_0-1}$. Suponiendo (3.40), y que el método de Runge-Kutta utilizado es de orden $r \geq 1$, además de las hipótesis del Teorema 3.21 con $\mu = 1$, las estimaciones (3.41), y condiciones de estabilidad (para más detalles, ver [5], Sección 3.2). Sean además $f \in H^r(0, T; L^2(\Omega))$, $A^\varepsilon \in L^\infty(\Omega)^{d \times d}$ y $\|\partial_t^r u^{0,H}(0)\|_{L^2(\Omega)} \leq C$, entonces, se tiene la siguiente estimación:*

$$\max_{n=0, \dots, N_0} \|u_n^{0,H} - u^0(t_n)\|_{L^2(\Omega)} \leq C(H^{l+1} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + \Delta t^r). \quad (3.42)$$

Si además A^ε es simétrico, entonces se tiene la estimación

$$\sum_{n=0}^{N_0-1} \Delta t_n \|u_n^{0,H} - u^0(t_n)\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C(H^l + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} + \Delta t^r)^2. \quad (3.43)$$

Todas las constantes C son independientes de $H, h, \varepsilon, \Delta t$.

3.2.4. Resolución del problema inverso discretizado

En primer lugar, se estudia el comportamiento de una discretización espacial utilizando FE-HMM para la resolución del problema inverso mediante el problema de optimización (3.25). Luego, se le añade el estudio del comportamiento de una discretización temporal del problema.

Discretización espacial del problema inverso

Para la resolución del problema inverso discretizado, se considera el modelo regularizado presentado en (3.25). Para resolver numéricamente el problema inverso, y al igual que en el Capítulo 2, se discretiza el dominio utilizando elementos simpliciales, y se aproximan los espacios de elementos finitos macroscópico y microscópico utilizando polinomios lineales por trozos. Para resolver el problema inverso, se tendrán como entradas las mediciones de los flujos dados por el tensor multiescala $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{(\tau_1, \tau_2) \times \Gamma_0}$, el intervalo $[\alpha, \beta]$ y el mapeo $(s, y) \mapsto A(s, y), \forall s \in [\alpha, \beta], y = x/\varepsilon \in Y = (0, 1)^d$. Los flujos se escriben en términos de MEF, con diámetro de los elementos de la malla denotado por h_d . Se considera el mismo conjunto admisible discreto definido en (2.19).

Así, el problema a minimizar se plantea como: encontrar $\sigma_\gamma^{\varepsilon, H} \in \mathcal{A}^H$ tal que

$$\Psi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon, H}) = \min_{m^H \in \mathcal{A}^H} \Psi^H(m^H), \quad (3.44)$$

donde

$$\begin{aligned}
\Psi^H(m^H) &= \sum_{l=1}^{l_0} \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon[f_l] \cdot \nu - A_m^{0,H} \nabla u_m^{0,H}[f_l] \cdot \nu\|_{L^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))}^2 \\
&+ \sum_{l=1}^{l_0} \|u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot) - u_m^{0,H}[f_l](\theta, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \gamma \|m^H\|_{H^1(\Omega)}^2 \\
&=: \Phi_1^H(m^H) + \Phi_2^H(m^H) + \gamma R(m^H).
\end{aligned} \tag{3.45}$$

La elección de tomar normas en $L^2(\tau_1, \tau_2, L^2(\Gamma_0))$ y $L^2(\Omega)$ en lugar de $H^2(\tau_1, \tau_2, L^2(\Gamma_0))$ y $H^3(\Omega)$ respectivamente es por simplicidad en la implementación numérica, sumado al hecho de que son normas más débiles que las originales, por lo que cualquier convergencia en las normas originales, también implicarán una convergencia en las normas elegidas.

Nuevamente, la resolución de este problema se hará mediante NGCI (Ver A). Para cada $m^H \in \mathcal{A}^H$ obtenido en cada iteración de dicho método, se calcula la solución $u_m^{0,H}$ del problema homogeneizado discreto: Encontrar $u_m^{0,H} \in L^2(0, T; S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H))$ tal que

$$\begin{aligned}
(\partial_t u_m^{0,H}(t), v^H) + B_H^0(u_m^{0,H}(t), v^H) dt &= (f(t), v^H), \forall v^H \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H), t \in (0, T) \\
u_m^{0,H}(t=0) &= u_0^H \text{ en } \Omega.
\end{aligned} \tag{3.46}$$

Una vez obtenido $u_m^{0,H}$, se calculan los flujos a partir de la descripción variacional (3.35).

El proceso de minimización termina cuando se cumple el criterio de convergencia del método sobre Ψ^H . Tal como se planteó en la discretización del problema elíptico, las propiedades del conjunto \mathcal{A}^H aseguran la existencia de un minimizador $\sigma_\gamma^{\varepsilon, H} \in \mathcal{A}^H$ del problema discretizado (3.44), para cualquier diámetro $H > 0$, por compacidad y equivalencia de normas en espacios de dimensión finita. La siguiente pregunta a abordar es si una sucesión $(\sigma_\gamma^{\varepsilon, H})_{H>0}$ de soluciones discretas convergen a algún minimizador $\sigma_\gamma^\varepsilon$ del problema continuo cuando $H \rightarrow 0$ (esto es, a medida que se refina la malla). Para ello, se establece un resultado análogo al Lema 3.14, en su versión discreta. En particular, se supone en adelante que el error numérico del solver sólo depende de H y h/ε .

Lema 3.25 *Bajo las mismas suposiciones que para el Teorema 3.23, sea $(m^H)_{H>0}$ en $\mathcal{A}^H \subset \mathcal{A}$ una sucesión convergente en $L^r(\Omega)$, $r \geq 1$, a cierto $m \in \mathcal{A}$ cuando $H \rightarrow 0$. Luego, la sucesión de aproximaciones de elementos finitos de los flujos $(A_m^{0,H} \nabla u_m^{0,H} \cdot \nu)_{H>0}$ converge a $A_m^0 \nabla u_m^0 \cdot \nu$ en $L^2(0, T; L^2(\Gamma_0))$, cuando H y $h/\varepsilon \rightarrow 0$.*

Demostración: Directo del Lema 3.14 y el Teorema 3.23. \square

Con esto, se garantiza la convergencia de las soluciones discretizadas $(\sigma_\gamma^{\varepsilon, H})_{H>0}$ a la solución del problema continuo en dimensión infinita $\sigma_\gamma^\varepsilon$, esto es,

$$\Psi(\sigma_\gamma^\varepsilon) = \min_{m \in \mathcal{A}} \Psi(m). \tag{3.47}$$

Teorema 3.26 *Sea $(\sigma_\gamma^{0,H})_{H>0}$ una sucesión de minimizadores del problema (3.44). Se suponen las mismas hipótesis que para el Teorema (3.21). Luego, existe una subsucesión que converge débil en $H^1(\Omega)$ a un minimizador del problema continuo (3.47) cuando $H, h/\varepsilon \rightarrow 0$.*

Demostración: La demostración para el primer término de Ψ^H , es decir, el término que involucra los flujos Φ_1^H , es idéntica a la del Teorema 2.14, salvo por los espacios involucrados y los resultados previos utilizados. En primer lugar, las propiedades minimizantes de $(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H})_{H>0}$ implican que la sucesión $(\Psi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}))_{H>0}$ es uniformemente acotada, por lo que $(\|\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}\|_{H^1(\Omega)})_{H>0}$ es uniformemente acotada. Luego, existe una subsucesión $(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H'})_{H'>0}$ y algún $\sigma_\gamma^\varepsilon \in \mathcal{A}$ tal que $\sigma_\gamma^{0,H'} \rightharpoonup \sigma_\gamma^\varepsilon$ débil en $H^1(\Omega)$. Luego, por el Lema 2.13, se tiene que

$$A_m^{0,H'} \nabla u_m^{0,H'} \cdot \nu \rightarrow A_{\sigma_\gamma^\varepsilon}^0 \nabla u_{\sigma_\gamma^\varepsilon}^0 \cdot \nu \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Gamma_0)),$$

lo que garantiza la convergencia de Φ_1 . La convergencia en Φ_2^H , por su parte, está garantizada por el Teorema (3.21). De la semicontinuidad inferior de las normas, se tiene que

$$\begin{aligned} \Psi(\sigma_\gamma^\varepsilon) &\leq \lim_{H, h/\varepsilon \rightarrow 0} \Phi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}) + \liminf_{H \rightarrow 0} \|\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}\|_{H^1(\Omega)}^2 \\ &\leq \liminf_{H, h/\varepsilon \rightarrow 0} (\Phi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}) + \|\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}\|_{H^1(\Omega)}^2) \\ &\leq \liminf_{H, h/\varepsilon \rightarrow 0} \Psi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}), \end{aligned}$$

donde $\Phi^H := \Phi_1^H + \Phi_2^H$. Sólo queda probar que $\sigma_\gamma^\varepsilon$ efectivamente es un minimizador del problema continuo (3.47). Como $\mathcal{C}^\infty(\overline{\Omega})$ es denso en $H^1(\Omega)$, se tiene que para $m \in \mathcal{A}$, existe una sucesión $(m_\eta)_{\eta>0} \in \mathcal{C}^\infty(\overline{\Omega}) \cap \mathcal{A}$ tal que

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \|m_\eta - m\|_{H^1(\Omega)} = 0. \quad (3.48)$$

Sea $\Pi^H : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}^H$ el operador de interpolación lineal. De las propiedades minimizantes de $(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H})_{H>0}$, se tiene que

$$\Psi^H(\sigma_\gamma^{\varepsilon,H}) \leq \Psi^H(\Pi^H m_\eta), \forall \eta > 0.$$

Tomando límite cuando $H, h/\varepsilon \rightarrow 0$, se tiene que, por las propiedades de Π^H , el Lema 3.25 y el Teorema 3.23, que

$$\Psi(\sigma_\gamma^\varepsilon) \leq \Psi(m_\eta).$$

Tomando límite cuando $\eta \rightarrow 0$, se tiene, por el Lema 3.25 y (3.48) que

$$\Psi(\sigma_\gamma^\varepsilon) \leq \Psi(m), \forall m \in \mathcal{A},$$

con lo que se concluye. \square .

Discretización completa del problema inverso

El funcional Ψ^H definido en (3.45) sólo está discretizado en la variable espacial mediante elementos finitos. Es necesario ahora definir una discretización de Ψ para la variable temporal también. Para ello, se consideran N_0 pasos $(\Delta t_n)_{n=0}^{N_0-1}$ que satisfacen las condiciones (3.40), donde $t_0 = \tau_1$ y $t_N = \tau_2$. y se define el funcional Ψ^{H,N_0} como

$$\begin{aligned} \Psi^{H,N_0}(m^H) &:= \Phi_1^{H,N_0}(m^H) + \Phi_2^{H,N_0}(m^H) + \|m^H\|_{H^1(\Omega)}^2 \\ &:= \sum_{l=1}^{l_0} \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t_n \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon[f_l](t_n) \cdot \nu - A_m^{0,H} \nabla u_m^{0,H,n}[f_l] \cdot \nu\|_{L^2(\Gamma_0)}^2 \\ &+ \sum_{l=1}^{l_0} \|u_\sigma^\varepsilon[f_l](\theta, \cdot) - u_m^{0,H}[f_l](\theta, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|m^H\|_{H^1(\Omega)}^2, \end{aligned} \quad (3.49)$$

donde $u_m^{0,H,n} \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H)$ denota la solución discreta asociada a m^H en el tiempo t_n encontrada mediante Runge-Kutta.

Para ver la utilidad de este funcional, primero hay que ver cómo se comporta la discretización temporal de los flujos en relación a los flujos homogeneizados en dimensión infinita, tal como se establece en el siguiente teorema.

Teorema 3.27 *Sean los N_0 pasos temporales variables $(\Delta t_n)_{n=0}^{N_0-1}$ que satisfacen las condiciones (3.40). Se suponen las mismas condiciones de los Teoremas 3.23 y 3.24. Además, se supone $H = \mathcal{O}(\Delta t)$. Se consideran las aproximaciones de los términos fuente $f^n = f(t_n)$ y los esquemas de diferencias finitas para las derivadas temporales*

$$\begin{aligned}\partial_t u^0(t_n) &\approx \frac{u^0(t_{n+1}) - u^0(t_n)}{\Delta t_n} \\ \partial_t u^{0,H,n} &\approx \frac{u^{0,H,n+1} - u^{0,H,n}}{\Delta t_n}.\end{aligned}$$

Sea

$$\Phi_1^{H,N_0} := \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t_n \|A^0 \nabla u^0(t_n) \cdot \nu - A^{0,H} \nabla u^{0,H,n} \cdot \nu\|_{L^2(\partial\Omega)}^2.$$

Entonces

$$\Phi_1^{H,N_0,l} \leq C(H^{3/2} \Delta t + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{3/2} \Delta t + H^{l+1/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q-1/2} + \Delta t^{r-1/2})^2. \quad (3.50)$$

Demostración: Para los esquemas de diferencias finitas considerados para las derivadas temporales de $u^0(t_n)$ y $u^{0,H,n}$, los esquemas resultantes para los flujos son

$$\begin{aligned}\int_{\partial\Omega} (A^0 \nabla u^0(t_n) \cdot \nu) v^H &= \int_{\Omega} \left(\frac{u^0(t_{n+1}) - u^0(t_n)}{\Delta t_n} \right) v^H + \int_{\Omega} A^0 \nabla u^0(t_n) \cdot \nabla v^H - \int_{\Omega} f(t_n) v^H \\ \int_{\partial\Omega} (A^{0,H} \nabla u^{0,H,n} \cdot \nu) v^H &= \int_{\Omega} \left(\frac{u^{0,H,n+1} - u^{0,H,n}}{\Delta t_n} \right) v^H + \int_{\Omega} A^{0,H} \nabla u^{0,H,n} \cdot \nabla v^H - \int_{\Omega} f^n v^H,\end{aligned}$$

Para todo $v^H \in S_c^1(\Omega, \mathcal{T}_H) \cap S_i^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$. A partir de esto, y siguiendo un proceso análogo a la demostración del Teorema 3.23 hasta (3.37), se obtiene

$$\begin{aligned}\Phi_1^{0,H,N_0} &= \sum_{n=0}^{N_0-1} \Delta t_n \|A^0 \nabla u^0(t_n) \cdot \nu - A^{0,H} \nabla u^{0,H,n} \cdot \nu\|_{L^2(\partial\Omega)}^2 \\ &\leq C \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t_n \left[H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^2 H^{-1/2} + H^{-1/2} \left\| \frac{u^0(t_{n+1}) - u^0(t_n)}{\Delta t_n} - \frac{u^{0,H,n+1} - u^{0,H,n}}{\Delta t_n} \right\|_{L^2(\Omega)} \right]^2 \\ &\leq C \sum_{n=0}^{N_0-1} \Delta t_n \left[H^{3/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^2 H^{-1/2} + H^{-1/2} \left(\left\| \frac{u^0(t_{n+1}) - u^{0,H,n+1}}{\Delta t_n} \right\|_{L^2(\Omega)} + \left\| \frac{u^0(t_n) - u^{0,H,n}}{\Delta t_n} \right\|_{L^2(\Omega)} \right) \right]^2\end{aligned}$$

Simplificando los términos Δt_n , y aplicando la primera desigualdad el Teorema 3.24, se obtiene

$$\Phi_1^{0,H,N_0} \leq C \sum_{n=0}^{N-1} \left[H^{3/2} \Delta t_n + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{3/2} \Delta t_n + H^{l+1/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q} H^{-1/2} + \Delta t^r H^{-1/2} \right]^2$$

Finalmente, utilizando la segunda desigualdad en (3.40) y que $H = \mathcal{O}(h/\varepsilon)$ y $H = \mathcal{O}(\Delta t)$, se obtiene finalmente que

$$\begin{aligned}\Phi_1^{0,H,N_0} &\leq C \sum_{n=0}^{N_0-1} \left[H^{3/2} \Delta t + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{3/2} \Delta t + H^{l+1/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q-1/2} + \Delta t^{r-1/2} \right]^2 \\ &\leq C \left[H^{3/2} \Delta t + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{3/2} \Delta t + H^{l+1/2} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{2q-1/2} + \Delta t^{r-1/2} \right]^2. \quad \square\end{aligned}$$

Como $r, q \geq 1$, todos los exponentes del lado derecho en la desigualdad (3.50) son positivos, por lo que el lado derecho converge a 0 cuando se refinan las mallas, esto es, cuando $h/\varepsilon, H, \Delta t \rightarrow 0$. Por lo tanto, la desigualdad asegura la convergencia de los flujos homogeneizados discretizados en espacio y tiempo hacia los flujos homogeneizados continuos a medida de que se refinan las mallas. Ahora bien, la función de interés (3.49) contempla los flujos dados por el tensor multiescala A^ε , y no el homogeneizado A^0 . El siguiente teorema establece la convergencia de la función de interés discretizada (en espacio y tiempo) a la función de interés en el caso continuo (3.47).

Teorema 3.28 *Sea $m \in \mathcal{A}$ la solución del problema continuo (3.47), esto es, $\bar{\Psi} = \Psi(m)$, donde $\bar{\Psi}$ está definido en (3.25). Sea $(m^H)_{H>0} \subset \mathcal{A}^H$ tal que $m^H \rightarrow m$ en $H^1(\Omega)$ cuando $H \rightarrow 0$. Se suponen las mismas condiciones del Teorema 3.27. Luego, $\Psi^{H,N_0}(m^H) \rightarrow \bar{\Psi}$, cuando $H, h/\varepsilon, \Delta t \rightarrow 0$, donde Ψ^{H,N_0} es el funcional definido en (3.49).*

Demostración: Notar que

$$\Phi_1^{H,N_0,l}(m^H) = \sum_{n=0}^{N_0-1} \Delta t_n \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon[f_l](t_n) \cdot \nu - A_{m^H}^0 \nabla u_{m^H}^0[f_l] \cdot \nu\|_{L^2(\Gamma_0)}^2$$

Por el Lema 3.14, el lado derecho converge a

$$\|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon[f_l] \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0[f_l] \cdot \nu\|_{L^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))}^2,$$

cuando $H, h/\varepsilon, \Delta t \rightarrow 0$. Así,

$$\Phi_1^{H,N_0,l}(m^H) \rightarrow \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon[f_l] \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0[f_l] \cdot \nu\|_{L^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))}^2,$$

cuando $H, h/\varepsilon, \Delta t \rightarrow 0$. Sumando sobre $l = 1, \dots, l_0$, se obtiene que

$$\Phi_1^{H,N_0} = \sum_{l=1}^{l_0} \Phi_1^{H,N_0,l}(m^H) \rightarrow \sum_{l=1}^{l_0} \|A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon[f_l] \cdot \nu - A_m^0 \nabla u_m^0[f_l] \cdot \nu\|_{L^2(\tau_1, \tau_2; L^2(\Gamma_0))}^2 = \Phi_1(m)$$

cuando $H, h/\varepsilon, \Delta t \rightarrow 0$. Por otro lado,

$$\Phi_2^{H,l}(m^H) = \|u_\sigma^\varepsilon(\theta, \cdot) - u_{m^H}^0(\theta, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2,$$

que por el Teorema 3.21, converge a

$$\|u_\sigma^\varepsilon(\theta, \cdot) - u_m^0(\theta, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2$$

cuando $H, h/\varepsilon \rightarrow 0$. Con esto,

$$\Phi_2^H = \sum_{l=1}^{l_0} \|u_\sigma^\varepsilon(\theta, \cdot) - u_{m^H}^{0,H}(\theta, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \rightarrow \sum_{l=1}^{l_0} \|u_\sigma^\varepsilon(\theta, \cdot) - u_m^0(\theta, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 = \Phi_2(m)$$

cuando $H, h/\varepsilon \rightarrow 0$. Finalmente, es claro que

$$\gamma R(m^H) = \gamma \|m^H\|_{H^1(\Omega)}^2 \rightarrow \gamma \|m\|_{H^1(\Omega)}^2 \gamma R(m)$$

cuando $H \rightarrow 0$. Sigue entonces que

$$\Psi^{H, N_0}(m^H) \rightarrow \Psi(m) = \bar{\Psi}$$

cuando $H, h/\varepsilon, \Delta t \rightarrow 0$. \square

Se concluye este capítulo presentando un algoritmo que sintetiza la resolución del problema inverso multiescala utilizando homogeneización numérica para la variable espacial y métodos de Runge-Kutta para la variable temporal.

Algoritmo 3.29 (*Resolución numérica del problema inverso parabólico mediante homogeneización numérica*)

Entradas: Flujos $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{(\tau_1, \tau_2) \times \Gamma_0}$, soluciones $u_\sigma^\varepsilon(\theta, \cdot)$ en el tiempo $\theta \in (\tau_1, \tau_2)$, el intervalo $[\alpha, \beta]$ y el parámetro de regularización $\gamma > 0$.

Inicializar: Elegir $m^H \in \mathcal{A}^H$ inicial. Para cada nueva actualización $m^H \in \mathcal{A}^H$ se procede como sigue:

1. Resolver el Problema de Controlabilidad Aproximada 3.9 para encontrar términos fuente $(f_l^{m^H})_{l=1}^{l_0}$ para las ecuaciones asociados al tensor $A_m^{0,H}$, con $l_0 = \frac{d(d+3)}{2}$.
2. Resolver el problema homogeneizado discreto: Encontrar $u_m^{0,H} : [0, T] \times S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H) \rightarrow \mathbb{R}$ tal que (3.46):

$$\begin{aligned} (\partial_t u_m^{0,H}(t), v^H) + B_H^0(u_m^{0,H}(t), v^H) &= (f(t), v^H), \forall v^H \in S_0^l(\Omega, \mathcal{T}_H), t \in (0, T) \\ u_m^{0,H}(t=0) &= u_0^H \text{ en } \Omega, \end{aligned}$$

donde $B_H^0(u^{0,H}(t), v^H)$ está dado por (2.18).

3. Calcular los flujos aproximados $A_m^{0,H} \nabla u_m^{0,H} \cdot \nu|_\Sigma$ resolviendo (3.35).
4. Evaluar $\Psi^H(m^H)$ dado por (3.45).
5. Terminar cuando se alcance cierta tolerancia.

Observación 3.30 Recordar que la actualización de m^H se realiza mediante un método de NGCI, descrito en el Anexo A.

3.3. Experimentos numéricos

En esta sección se presentan experimentos para ilustrar, ejemplificar y validar experimentalmente el método propuesto para la resolución del problema inverso parabólico multiescala.

Se considera un modelo multiescala análogo al caso elíptico, donde el tensor asociado es anisotrópico afín con respecto al parámetro σ . La ecuación de estado es el problema

$$\begin{cases} \partial_t u_i^\varepsilon - \operatorname{div}(A_\sigma^\varepsilon \nabla u_i^\varepsilon) = f_i \text{ en } (0, T) \times \Omega \\ u_i^\varepsilon = 0 \text{ sobre } (0, T) \times \partial\Omega \\ u_i^\varepsilon(t=0) = u_0 \text{ en } \Omega \end{cases} \quad (3.51)$$

donde los términos fuente $(f_i)_{i=1}^{l_0}$ se obtienen al resolver el Problema de Controlabilidad Aproximada 3.9, $u_0(x, y) = e^{-((x_1-1/2)^2+(x_2-1/2)^2)}$ es la condición inicial, y la función escalar a estimar σ y el tensor A_σ^ε son iguales a los de los experimentos del Capítulo 2, es decir,

$$\sigma(x) = 16(x_1^2 - x_1)(x_2^2 - x_2) + 1$$

y A_σ^ε es de la forma

$$A_\sigma^\varepsilon(x) = \sigma(x) \begin{pmatrix} \cos^2(2\pi \frac{x_1}{\varepsilon}) + 1 & 0 \\ 0 & \operatorname{sen}(2\pi \frac{x_2}{\varepsilon}) + 2 \end{pmatrix}.$$

Se considera la celda de referencia $Y = (0, \varepsilon)^2$. De esta manera, para $y = (y_1, y_2) \in Y$, el tensor se puede reescribir como

$$A_\sigma^\varepsilon(x) = A_\sigma(x, y) = \sigma(x) \begin{pmatrix} \cos^2(2\pi y_1) + 1 & 0 \\ 0 & \operatorname{sen}(2\pi y_2) + 2 \end{pmatrix}.$$

Para $m^H \in \mathcal{A}^H$ se definen los tensores multiescala $A_m^{\varepsilon, H}(x)$ como

$$A_m^{\varepsilon, H}(x) = A_m^H(x, y) = m^H(x) \begin{pmatrix} \cos^2(2\pi y_1) + 1 & 0 \\ 0 & \operatorname{sen}(2\pi y_2) + 2 \end{pmatrix}.$$

Estos tensores se homogeneizan, obteniendo así los tensores $A_m^{0, H}$, a partir de los cuales se pueden calcular las soluciones $u^{0, H}$ de la ecuación (3.46), y con ello, se pueden calcular los flujos $A_m^{0, H} \nabla u_m^{0, H} \cdot \nu|_{\partial\Omega}$. Esto, más los flujos reales $A_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega}$ (que se consideran datos), permiten evaluar el funcional $\Psi^H(m^H)$ definido en (3.49).

Es importante destacar que para estos experimentos numéricos no se pudo proceder exactamente como se propuso en el Algoritmo 3.29 por lo siguiente: en dicho algoritmo, en cada actualización de $m^H \in \mathcal{A}^H$ se debía resolver el Problema de Controlabilidad Aproximada 3.9. Es decir, el Algoritmo propone una solución que involucra problemas de control óptimo anidados. La librería que se utilizó para la resolución de estos problemas de control óptimo fue *dolfin-adjoint*, donde las actualizaciones del parámetro están determinados por ciertos métodos implementados en la librería y que, al menos bajo los conocimientos del autor de esta tesis, no permiten resolver directamente problemas de control óptimo anidados. Así, el hecho de que el Algoritmo 3.29 involucre problemas de control anidados presenta una dificultad en cuanto a su implementación.

A pesar de lo anterior, se llevaron a cabo experimentos de la siguiente manera: dado un parámetro inicial $m^H \in \mathcal{A}^H$ arbitrario, se resuelve el Problema de Controlabilidad Aproximada 3.9 asociado a dicho parámetro, y en adelante, en cada iteración se procede desde el Paso 2. En otras palabras, se trabaja siempre con los términos fuentes resultantes del problema de controlabilidad aproximada asociado al parámetro escogido inicialmente.

Otra dificultad a considerar está en la convergencia del método utilizado, que era muy lenta. Se consideró como criterio de convergencia una reducción del gradiente relativo de 10^{-8} , o que se alcanzaran 30 iteraciones del método de NGCI⁹. En ningún caso se alcanzó la tolerancia, alcanzando una de órdenes de magnitud que variaban entre 10^{-5} y 10^{-6} . Se podrían considerar más de 30 iteraciones de NGCI como máximo para acercarse más a la tolerancia deseada, pero para ello podría ser necesaria una mayor potencia computacional¹⁰, o bien, se necesitaría una manera más eficiente de implementar el algoritmo.

Con todo esto en mente, los siguientes experimentos no se deben tomar como un fiel reflejo del método propuesto, sino como una primera aproximación.

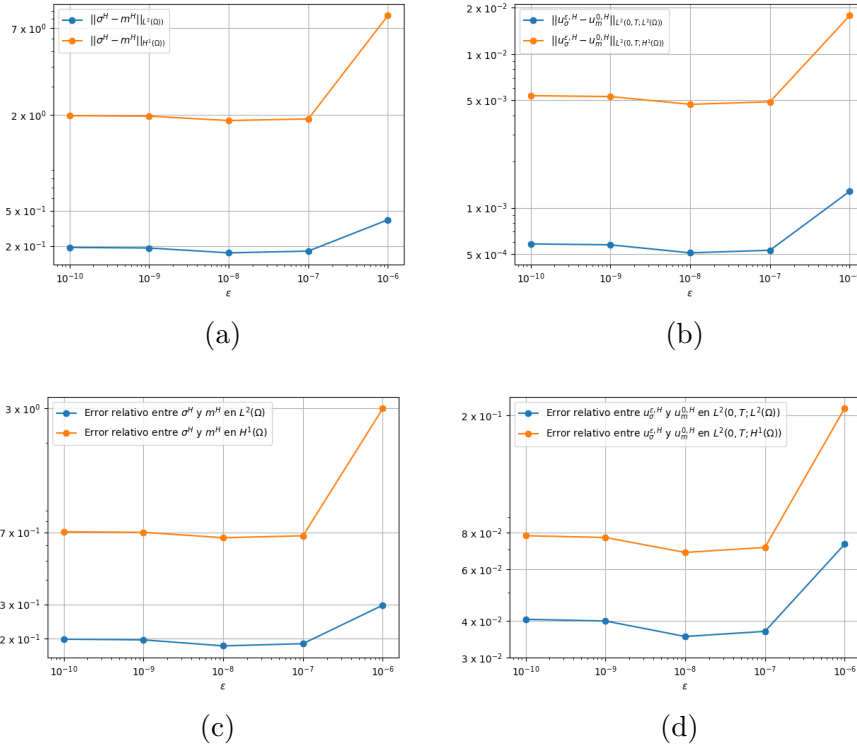


Figura 3.1: Errores de estimación para distintos valores de ε . En (a) (resp. (c)) se visualizan los errores (resp. errores relativos) del parámetro m^H obtenido como solución al problema inverso. En (b) (resp. (d)) se visualizan los errores (resp. errores relativos) de las soluciones del problema directo homogeneizado $u_m^{0,H}$ asociadas al parámetro m^H . Se utilizó $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-7}$, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y para cada ε , se tomó $h = \varepsilon H$.

⁹Esto es, 30 iteraciones de Newton. Las iteraciones de Gradiente Conjugado en cada iteración de Newton alcanzaban un máximo de 200.

¹⁰En este caso, se utilizó un computador con Procesador Intel(R) Core(TM) i5-7200U CPU @ 2.50GHz 2.70 GHz con Memoria RAM de 8 GB y Sistema Operativo Windows 10, dentro del entorno WSL (Windows Subsystem for Linux), Ubuntu 22.04.1.

En la Figura 3.1 se observa que para $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-7}$ fijo, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h = \varepsilon H$, los errores alcanzaron su mínimo experimental al tomar $\varepsilon = 10^{-8}$. Aún así, los errores para los valores de ε tomados se mantuvieron relativamente parejos, excepto para el caso $\varepsilon = 10^{-6}$, donde el error aumentó considerablemente. Para valores de ε más grandes en orden de magnitud, el algoritmo presentó errores numéricos, por lo que no se pudieron obtener errores para dichos valores. Presumiblemente estos errores hubieran sido más grandes, en primer lugar por la tendencia que sugiere el error alcanzado para $\varepsilon = 10^{-6}$, y en segundo lugar, porque la teoría establece que la G -convergencia se alcanza cuando ε tiende a 0.

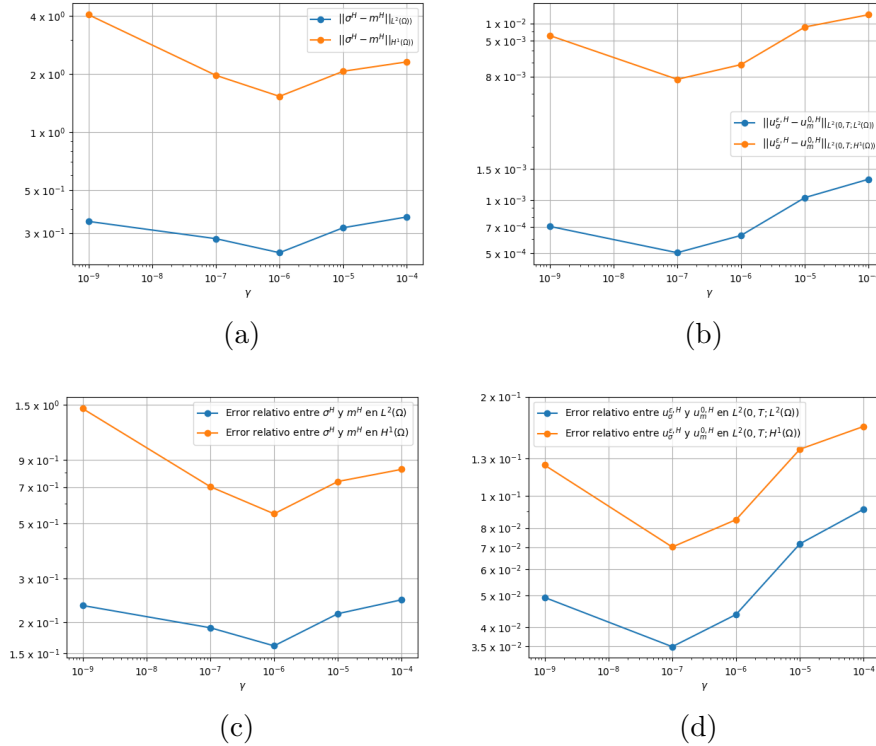


Figura 3.2: Errores de estimación para distintos valores de γ . En (a) (resp. (c)) se visualizan los errores (resp. errores relativos) del parámetro m^H obtenido como solución al problema inverso. En (b) (resp. (d)) se visualizan los errores (resp. errores relativos) de las soluciones del problema directo homogeneizado $u_m^{0,H}$ asociadas al parámetro m^H . Se utilizó $\varepsilon = 10^{-8}$, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h = \varepsilon H$.

En la Figura 3.2 se observa que tomando $\varepsilon = 10^{-8}$, $H \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ y $h = \varepsilon H$, los errores mínimos se alcanzaron al tomar $\gamma = 10^{-6}$. Cabe mencionar que se eligió $\varepsilon = 10^{-8}$ porque los gráficos de la Figura 3.1 sugieren que es un buen valor para considerar. Para $\gamma = 10^{-8}$, el método reportó un error numérico, por lo que no se pudo obtener errores para este valor de γ .

En todos los gráficos, tanto de la Figura 3.1 como los de la Figura 3.2, se observa que los errores de las soluciones $u_m^{0,H}$ los problema directos homogeneizados en relación a $u_\sigma^{\varepsilon,H}$ eran considerablemente menores a los errores de las soluciones m^H de los problemas inversos en relación a σ^H . Esto puede deberse, en primer lugar, a que el funcional a minimizar cuenta

con un término que involucra a u_σ^ε en el tiempo θ como dato, mientras que el conocimiento sobre σ es más indirecto: es a través de los flujos resultantes sobre el medio.

El hecho de que se presenten mayores errores en las soluciones del problema inverso m^H que en las soluciones del problema directo $u_m^{0,H}$ se puede tener en cuenta al momento de considerar qué es lo que se busca conocer. Si se busca el parámetro σ^H en sí mismo, los experimentos muestran que los errores serán mayores, por lo que se deberán tener mayores consideraciones al implementar el algoritmo. Es pertinente preguntarse si estos errores hubiesen sido menores si se hubiese implementado el Algoritmo 3.29 en su plenitud, es decir, incluyendo el Paso 1 en cada iteración. También cabe preguntarse si, con mayor potencia computacional o una mejor implementación del algoritmo, se hubiese podido alcanzar la tolerancia como criterio de convergencia en lugar de un máximo de iteraciones. Por otro lado, si se busca un parámetro m^H que, sin necesariamente ser muy cercano a σ^H , permita establecer soluciones $u_m^{0,H}$ suficientemente cercanas a $u_\sigma^{\varepsilon,H}$, los experimentos sugieren que la implementación del Algoritmo 3.29 puede ser adecuada, incluso sin el Paso 1 y sin necesariamente alcanzar la tolerancia deseada para la reducción relativa del gradiente.

Como se dijo anteriormente, estos experimentos constituyen apenas una primera aproximación para validar el método propuesto a lo largo de este Capítulo. Para validarlo con más robustez, será necesario:

1. Implementar el Algoritmo 3.29 de una manera tal que se pueda resolver, para cada actualización de m^H , el Problema de Controlabilidad Aproximada 3.9.
2. Ejecutar la implementación en un computador con más capacidad, de manera que la convergencia se alcance en un tiempo razonable.
3. Probar una variedad mayor de experimentos. Es decir, considerar distintos parámetros a estimar σ , distintos mapeos $(s, x) \mapsto A_s(x)$, distintos dominios Ω , entre otras posibles variantes.
4. Hacer una reducción de base en una fase previa, de manera que el Algoritmo 3.29 se aplique de manera más eficiente.¹¹

Opcionalmente, se pueden considerar otros métodos de optimización distintos a NGCI, como por ejemplo, BFGS¹², Método del Punto Interior, entre otros.

¹¹Esto también se hizo en [4] para el Problema Elíptico, cosa que no se abordó en esta tesis.

¹²Método de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno

Conclusiones

A grandes rasgos, se cumplieron los objetivos de la tesis. En particular, el estudio del problema inverso elíptico ya había sido abordado exitosamente por Abdulle y DiBlasio en [4], por lo que el estudio de dicho problema no fue un aporte de esta tesis, pero sí fue una guía para abordar el problema inverso parabólico.

Por lo anterior, el aporte de la tesis fue la forma de definir y abordar un problema inverso parabólico multiescala: mediante homogeneización, incluyendo un análisis teórico y numérico mediante el método de FE-HMM. A partir de este último, se establece un método numérico para su resolución, asegurando su correctitud y convergencia. A estos aportes se le agregaron experimentos numéricos, a partir de los cuales se evidencian dificultades del método propuesto, que se pueden proponer para ser abordados como trabajo a futuro para validar el método con mayor robustez. En particular, queda como trabajo a futuro el implementar un método para resolver el Algoritmo 3.29 con los problemas de control anidados.

Otro posible trabajo a futuro es implementar un método más eficiente del método propuesto en esta tesis para la resolución del problema inverso parabólico multiescala, por ejemplo, mediante una reducción de base, cosa que se hizo en [4] y que en esta tesis no se abordó.

Las aplicaciones de esta tesis pueden ser variadas mientras se puedan obtener las mediciones correspondientes en distintos contextos de ingenierías y otras ciencias, siendo los problemas que motivaron esta tesis -los problemas hidrodinámicos y de transporte- casos particulares. Otro trabajo a futuro, por tanto, es aplicar los resultados de esta tesis a estos contextos, considerando sus particularidades. Por ejemplo, en el Anexo C se da una idea a grandes rasgos sobre cómo los resultados de esta tesis se podrían aplicar a los problemas hidrodinámicos y de transporte, lo que podría constituir un punto de partida para resolverlos de manera concreta, con datos reales.

En síntesis, los aportes de esta tesis se encuentran fundamentalmente en la propuesta de método como punto de partida para resolver un problema inverso parabólico multiescala, respaldado por el análisis teórico y numérico. A partir de este punto de partida se puede explorar más su implementación y aplicabilidad.

Bibliografía

- [1] A. Abdulle. The finite element heterogeneous multiscale method: A computational strategy for multiscale PDEs. *GAKUTO Int. Ser. Math. Sci. Appl.*, 31:133–181, 01 2009.
- [2] A. Abdulle. A priori and a posteriori error analysis for numerical homogenization: A unified framework. *Ser. Contemp. Appl. Math. CAM*, 16:280–305, 10 2011.
- [3] A. Abdulle and O. Budáč. An Adaptive Finite Element Heterogeneous Multiscale Method for Stokes Flow in Porous Media. *Multiscale Modeling & Simulation*, 13:256–290, 01 2015.
- [4] A. Abdulle and A. Di Blasio. Numerical homogenization and model order reduction for multiscale inverse problems. *Multiscale Modeling & Simulation*, 17(1):399–433, 2019.
- [5] A. Abdulle and G. Vilmart. Coupling heterogeneous multiscale FEM with Runge-Kutta methods for parabolic homogenization problems: A fully discrete space-time analysis. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 22(6), June 2012.
- [6] G. Alessandrini and R. Gaburro. Determining conductivity with special anisotropy by boundary measurements. *Siam Journal on Mathematical Analysis - SIAM J MATH ANAL*, 33, 2001.
- [7] G. Allaire. Homogenization of the stokes flow in a connected porous medium. *Asymptotic Analysis*, 2:203–222, 1989.
- [8] G Allaire. Homogenization of the unsteady Stokes equations in porous media. *Pitman Research Notes in Mathematics Series*, pages 109–123, 1992.
- [9] G. Allaire and A. Craig. *Numerical Analysis and Optimization: An Introduction to Mathematical Modelling and Numerical Simulation*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. OUP Oxford, 2007.
- [10] S. Balay, S. Abhyankar, M. F. Adams, S. Benson, J. Brown, P. Brune, K. Buschelman, E. M. Constantinescu, L. Dalcin, A. Dener, V. Eijkhout, W. D. Gropp, V. Hapla, T. Isaac, P. Jolivet, D. Karpeev, D. Kaushik, M. G. Knepley, F. Kong, S. Kruger, D. A. May, L. Curfman McInnes, R. Tran Mills, L. Mitchell, T. Munson, J. E. Roman, K. Rupp, P. Sanan, J. Sarich, B. F. Smith, S. Zampini, H. Zhang, and J. Zhang. PETSc Web page. <https://petsc.org/>, 2022.
- [11] A. Bensoussan, J.-L. Lions, and G. Papanicolaou. *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*. North-Holland, Amsterdam, 1978.

- [12] S. Brahim-Otsmane, G. A. Francfort, and F. Murat. Correctors for the homogenization of the wave and heat equations. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 71:197–231, 1992.
- [13] H. Brezis. *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*. Universitext. Springer New York, 2010.
- [14] A. Calderón. On inverse boundary value problem. *Computational & Applied Mathematics - COMPUT APPL MATH*, 25, 01 2006.
- [15] D. Cioranescu and P. Donato. *An Introduction to Homogenization*, volume 17. Oxford University Press, 01 1999.
- [16] S. C. Eisenstat and H. F. Walker. Choosing the forcing terms in an inexact newton method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 17(1):16–32, jan 1996.
- [17] I. Ekeland and R. Temam. *Analyse convexe et problèmes variationnels*. 1974.
- [18] A. C. Liakopoulos Dr. Eng. Darcy’s coefficient of permeability as symmetric tensor of second rank. *International Association of Scientific Hydrology. Bulletin*, 10(3):41–48, 1965.
- [19] H. W. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer. *Regularization of Inverse Problems*, volume 375 of *Mathematics and Its Applications*. Kluwer Academic Publishers Group, Dordrecht, 1996.
- [20] L.C. Evans. *Partial Differential Equations*. Graduate studies in mathematics. American Mathematical Society, 2010.
- [21] J. Fabricius, E. Haller, and P. Wall. Homogenization of the Stokes equation with mixed boundary condition in a porous medium. *Cogent Mathematics*, 4, 05 2017.
- [22] M. Gehre, B. Jin, and X. Lu. An analysis of finite element approximation in electrical impedance tomography. *Inverse Problems*, 30, 12 2013.
- [23] D. Gilbarg and N.S. Trudinger. *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Classics in Mathematics. Springer Berlin Heidelberg, 2001.
- [24] R. Glowinski, J.-L. Lions, and J. He. *Exact and Approximate Controllability for Distributed Parameter Systems: A Numerical Approach*. Encyclopedia of Mathematics and its Applications. Cambridge University Press, 2008.
- [25] P. Hansen. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the l-curve. *SIAM Review*, 34(4):561–580, 1992.
- [26] P. Hansen and D. O’Leary. The use of the l-curve in the regularization of discrete ill-posed problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 14(6):1487–1503, 1993.
- [27] V. Jikov, S. Kozlov, and O. Oleinik. *Homogenization of Differential Operators and Integral Functionals*, pages 298–322. Springer-Verlag, 01 1994.

- [28] O. A. Ladyzhenskaia. *The boundary value problems of mathematical physics / O.A. Ladyzhenskaya ; translated by Jack Lohwater*. Springer-Verlag New York, 1985.
- [29] H. P. Langtangen and A. Logg. *Solving PDEs in Python*. Springer, 2017.
- [30] J.-L. Lions and E. Magenes. *Problèmes aux limites non homogènes et applications*. 1968.
- [31] Y.F. Liu, X. Wang, L. Cao, and Y.Z. Wang. Calculation of the effective permeability tensor used in the naturally fractured reservoirs simulation. In *Proceedings of the 2015 International Conference on Electrical, Automation and Mechanical Engineering*, pages 722–724. Atlantis Press, 2015/07.
- [32] N. Meyers. An L^p -estimate for the gradient of solutions of second order elliptic divergence equations. *Annali Della Scuola Normale Superiore Di Pisa-classe Di Scienze*, 17:189–206, 1963.
- [33] N. Meyers. An l^p -estimate for the gradient of solutions of second order elliptic divergence equations. *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa - Classe di Scienze*, 17(3):189–206, 1963.
- [34] S. Mitusch, S. Funke, and J. Dokken. dolfin-adjoint 2018.1: automated adjoints for FEniCS and Firedrake. *Journal of Open Source Software*, 4(38):1292, 2019.
- [35] O.Scherzer. The use of morozov’s discrepancy principle for tikhonov regularization for solving nonlinear ill-posed problems. *Computing*, 51:45–60, 2005.
- [36] Franck Ouaki, Grégoire Allaire, Sylvain Desroziers, and Guillaume Enchéry. A Priori Error Estimate of a Multiscale Finite Element Method for Transport Modeling. *SeMA Journal: Boletín de la Sociedad Española de Matemática Aplicada*, 67(1):1–37, 2015.
- [37] A. Pazy. *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*. Applied mathematical sciences. Springer, 1983.
- [38] A. Pehlivanov, R. Lazarov, G. Carey, and S. Chow. Superconvergence analysis of approximate boundary-flux calculations. *Numer. Math.*, 63:483–501, 12 1992.
- [39] T. Steihaug. Local and superlinear convergence for truncated iterated projections methods. *Math. Program.*, 27(2):176–190, oct 1983.
- [40] J. Sylvester and G. Uhlmann. A global uniqueness theorem for an inverse boundary value problem. *Annals of Mathematics*, 125:153–169, 1987.
- [41] G. Yuan and M. Yamamoto. Lipschitz stability in the determination of the principal part of a parabolic equation. *ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations*, 15:525–554, 2009.
- [42] H. Zhang, W. Davison, B. Knight, and S. McGrath. In situ measurement of solution concentrations and fluxes of trace metals in soils using dgt. *Environmental Science and Technology*, 32(5):704–710, March 1998.
- [43] H. Zhang, W. Davison, S. Miller, and W. Tych. In situ high resolution measurements of fluxes of ni, cu, fe, and mn and concentrations of zn and cd in porewaters by dgt. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 59(20):4181–4192, 1995.

Anexos

A. Método de NGCI

En esta sección, se presenta el esquema general para la resolución de los problemas inversos tratados en la tesis. Más específicamente, se plantean problemas de control de EDP cuyas funciones objetivo dependen del parámetro control m (parámetro sobre el cual se minimiza) en un conjunto admisible \mathcal{A} convexo, cerrado, no vacío en algún espacio de Hilbert. Las funciones objetivo también dependen de las soluciones u (que, como se verá, dependen implícitamente de m) de una ecuación de estado definida en su formulación variacional sobre un espacio de Hilbert V . El problema es el siguiente:

$$\begin{aligned} & \underset{m \in \mathcal{A}}{\text{mín}} J(m, u) \\ & \text{sujeto a } F(u, m, v) = 0, \forall v \in V, \end{aligned} \tag{52}$$

donde la función objetivo $J : \mathcal{A} \times V \rightarrow \mathbb{R}$ es estrictamente convexa en la variable m y $F : V \times \mathcal{A} \times V \rightarrow \mathbb{R}$ es lineal con respecto a las variables u y v , lo que será útil al momento de calcular sus derivadas, pero no necesariamente lineal con respecto a la variable m . Además, F se puede escribir de la forma $F(u, m, v) = a(u, m, v) - L(m, v)$, donde, para cada $m \in \mathcal{A}$, el mapeo $m \mapsto a(\cdot, m, \cdot)$ es una forma bilineal, continua y coercitiva y $L(m, \cdot) \in V^*$. En virtud del teorema de Lax-Milgram (ver, por ejemplo, [13], Sección 5.3), para cada $m \in \mathcal{A}$, existe un único $u \in V$ tal que

$$a(u, m, v) = L(m, v), \forall v \in V.$$

Es decir, $F(u, m, v) = 0, \forall v \in V$. Con esto, para cada m , existe un único $u \in V$ que cumple con la restricción del problema (52). En particular, $u = u(m) =: u_m$ y así, $J(m, u) = J(m, u_m) =: \Psi(m)$, notación que se utiliza más adelante y también en el planteamiento de los problemas de optimización de los Capítulos 2 y 3.

El método que se utiliza para resolver el problema (52) en esta tesis es el método de Newton-Gradiente Conjugado Inexacto (NGCI). Este método requiere que tanto la función objetivo J como la función que define las restricciones F sean doblemente diferenciables. Para una función f , se utilizará la notación $f_v(v)(\tilde{v})$ para referirse a la derivada de Gateaux de f con respecto a la variable v en la dirección \tilde{v} .

A continuación se dará una descripción de cómo se aplica este método al problema (52).

1. **Inicialización.** Se eligen $m, \hat{m} \in \mathcal{A}$ arbitrarios.

2. **Obtención del gradiente.**

2.1. Se define el Lagrangiano $\mathcal{L} : V \times \mathcal{A} \times V \rightarrow \mathbb{R}$ dado por

$$\mathcal{L}(u, m, p) = J(m, u) + F(u, m, p)$$

2.2. Se resuelve el problema de estado: encontrar $u \in V$ tal que $\mathcal{L}_p(u, m, p)(\tilde{p}) = 0, \forall \tilde{p} \in V$. Esto es,

$$F(u, m, \tilde{p}) = 0, \forall \tilde{p} \in V. \tag{53}$$

2.3. se resuelve el problema adjunto: encontrar $p \in V$ tal que $\mathcal{L}_u(u, m, p)(\tilde{u}) = 0, \forall \tilde{u} \in V$. Esto es,

$$J_u(m, u)(\tilde{u}) + F(\tilde{u}, m, p) = 0, \forall \tilde{u} \in V. \quad (54)$$

2.4. Se define el gradiente: $\mathcal{G}(m)(\tilde{m}) := \mathcal{L}_m(u, m, p)(\tilde{m}), \forall \tilde{m} \in \mathcal{A}$. Esto es,

$$\mathcal{G}(m)(\tilde{m}) = J_m(m, u)(\tilde{m}) + F_m(u, m, p)(\tilde{m}), \forall \tilde{m} \in \mathcal{A}, \quad (55)$$

donde u y p son soluciones de los problemas (53) y (54) respectivamente.

3. Evaluación de la acción del Hessiano.

3.1. Se define el Lagrangiano de segundo orden $\mathcal{L}^H : (V \times \mathcal{A} \times V)^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dado por las contribuciones de las derivadas parciales del Lagrangiano en una determinada dirección, o bien, las contribuciones del gradiente (55) y los lados izquierdos de las ecuaciones (53) y (54). Esto es,

$$\mathcal{L}^H(u, m, p; \hat{u}, \hat{m}, \hat{p}) := \mathcal{L}_u(u, m, p)(\hat{u}) + \mathcal{L}_m(u, m, p)(\hat{m}) + \mathcal{L}_p(u, m, p)(\hat{p}).$$

O bien,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^H(u, m, p; \hat{u}, \hat{m}, \hat{p}) &= J_m(m, u)(\hat{m}) + F_m(u, m, p)(\hat{m}) \\ &\quad + F(u, m, \hat{p}) + J_u(m, u)(\hat{u}) + F(\hat{u}, m, p). \end{aligned}$$

3.2. Se resuelve el problema de estado incremental: Encontrar $\hat{u} \in V$ tal que

$$\mathcal{L}_p^H(u, m, p; \hat{u}, \hat{m}, \hat{p})(\tilde{p}) = 0, \forall \tilde{p} \in V.$$

Esto es,

$$F_m(u, m, \tilde{p})(\hat{m}) + F(\hat{u}, m, \tilde{p}) = 0, \forall \tilde{p} \in V. \quad (56)$$

3.3. Se resuelve el problema adjunto incremental: Encontrar $\hat{p} \in V$ tal que

$$\mathcal{L}_u^H(u, m, p; \hat{u}, \hat{m}, \hat{p})(\tilde{u}) = 0, \forall \tilde{u} \in V.$$

Esto es, $\forall \tilde{u} \in V$,

$$J_{m,u}(m, u)(\hat{m})(\tilde{u}) + F_m(\tilde{u}, m, p)(\hat{m}) + F(\tilde{u}, m, \hat{p}) + J_{u,u}(m, u)(\hat{u})(\tilde{u}) = 0. \quad (57)$$

3.4. Se define la acción del Hessiano en la dirección \hat{m} :

$$(\tilde{m}, \mathcal{H}(m)(\hat{m})) := \mathcal{L}_m^H(u, m, p, \hat{u}, \hat{m}, \hat{p})(\tilde{m}), \forall \tilde{m} \in \mathcal{A}.$$

Esto es,

$$\begin{aligned} (\tilde{m}, \mathcal{H}(m)(\hat{m})) &= J_{m,m}(m, u)(\hat{m})(\tilde{m}) + F_{m,m}(u, m, p)(\hat{m})(\tilde{m}) \\ &\quad + F_m(u, m, \hat{p})(\tilde{m}) + J_{u,m}(m, u)(\hat{u})(\tilde{m}) + F_m(\hat{u}, m, p)(\tilde{m}), \end{aligned} \quad (58)$$

donde u, p, \hat{u} y \hat{p} son soluciones de los problemas (53), (54), (56) y (57) respectivamente.

4. Método de NGCI.

- 4.1. En cada iteración y para m dado, se resuelve la siguiente ecuación que encuentra una nueva dirección \hat{m} :

$$(\tilde{m}, \mathcal{H}(m)(\hat{m})) = -\mathcal{G}(m)(\tilde{m}), \forall \tilde{m} \in \mathcal{A}, \quad (59)$$

La ecuación (59) se resuelve de manera inexacta mediante una terminación temprana de iteraciones de gradiente conjugado vía criterios de Eisenstat-Walker [16] (para prevenir *oversolving*) y de Steihaug [39] (para prevenir curvatura negativa).

- 4.2. Se realiza una búsqueda lineal de Armijo para encontrar un α tal que se alcance una reducción suficiente del funcional de costo:

$$\Psi(m + \alpha\hat{m}) \leq \Psi(m) + \alpha c_{armijo}(\hat{m}, g), \quad (60)$$

donde la constante de Armijo c_{armijo} se elige en el intervalo $[10^{-5}, 10^{-4}]$ y

$$(g, \tilde{m}) := \mathcal{G}(m)(\tilde{m}), \forall \tilde{m} \in \mathcal{A}.$$

Una vez encontrado α que satisfaga (60), se actualiza $m \leftarrow m + \alpha\hat{m}$ y se vuelve al paso 4.1., lo que implica volver a obtener el gradiente en el paso 2 y evaluar la acción del Hessiano en el paso 3 para el nuevo m .

- 4.3. El criterio de convergencia del método de NGCI consiste en una reducción relativa de la norma del gradiente. Esto es,

$$\frac{\|g\|}{\|g_0\|} \leq \tau,$$

para una tolerancia $\tau > 0$.

B. Elección de los términos fuentes para el problema inverso parabólico

Esta sección corresponde a una revisión del primer ejemplo del Capítulo 1 en [24] para la construcción de los términos fuentes necesaria para la resolución del problema inverso parabólico en el Capítulo 3 de esta tesis.

Problema de Controlabilidad Aproximada

Sea $\omega \subset \Omega$ abierto, arbitrariamente pequeño. Se consideran las funciones de control f con soporte en $\bar{\omega} \times (0, \theta)$, sobre la ecuación de estado

$$\begin{cases} \partial_t u - \mathcal{A}u = f, & \text{en } Q := \Omega \times (0, T) \\ u = 0, & \text{sobre } \Sigma := \partial\Omega \times (0, T) \\ u(t = 0) = u_0 \in L^2(\Omega) \end{cases} \quad (61)$$

donde $f \in L^2(\omega \times (0, \theta))$, y \mathcal{A} es algún operador uniformemente elíptico¹³. El sistema tiene solución única, con $u \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ y $\partial_t u \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$. La solución u es continua de $[0, T]$ en $L^2(\Omega)$. Se estudiará la controlabilidad aproximada del problema: Para $\delta > 0$ y $\rho \in L^2(\Omega)$, se busca f tal que

$$\|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta$$

La existencia de dichos f está garantizada por el siguiente resultado de densidad.

Proposición .31 *El espacio $\{u[f](\theta, \cdot) \in L^2(\Omega)\}$ es denso en $L^2(\Omega)$.*

Una vez garantizada dicha existencia, se formula el problema de control óptimo aproximado:

$$\inf_f \frac{1}{2} \|f\|_{L^2(\omega \times (0, \theta))}^2 \quad (62)$$

$$\text{sujeto a } \begin{cases} f \in L^2(\omega \times (0, \theta)) \\ \|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta \end{cases} \quad (63)$$

Este problema tiene solución única. Se busca un esquema de aproximación numérica para encontrarlo.

¹³Esto es, si H es un espacio de Hilbert, el operador $\mathcal{A} : H \rightarrow H^*$ satisface que, para todo $u \in H$, $\langle \mathcal{A}u, u \rangle_{H^*, H} \geq c \|u\|_H^2$, para cierto $c > 0$. En el caso particular de interés en el Capítulo 3, $\mathcal{A}u = -\text{div}(A\nabla u)$, donde $A \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$.

Problema dual

En adelante, para un espacio de Hilbert H , se denota $(\cdot, \cdot)_H$ su producto interno correspondiente. En el caso particular $H = L^2(\Omega)$, se denotará simplemente (\cdot, \cdot) . Sean

$$F_1(f) = \frac{1}{2} \|f\|_{L^2(\omega \times (0, \theta))}^2 \quad (64)$$

$$F_2(g) = \begin{cases} 0, & \text{si } \|g - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta \\ +\infty, & \text{si no} \end{cases} \quad (65)$$

$$Lf = u[f](\theta, \cdot) \quad (66)$$

Así, $L \in \mathcal{L}(L^2(\omega \times (0, \theta)), L^2(\Omega))$. El problema de control óptimo aproximado es equivalente a resolver

$$\inf_{f \in L^2(\omega \times (0, \theta))} (F_1(f) + F_2(Lf))$$

Luego, por Teorema de Dualidad de Fenchel y Rockaffellar (ver, por ejemplo, [17]),

$$\inf_{f \in L^2(\omega \times (0, \theta))} (F_1(f) + F_2(Lf)) = - \inf_{g \in L^2(\Omega)} (F_1^*(L^*g) + F_2^*(-g)),$$

donde

$$F_1^*(f) = \sup_{\hat{f} \in L^2(\omega \times (0, \theta))} ((f, \hat{f}) - F_1(\hat{f})) = F_1(f)$$

$$F_2^*(g) = \sup_{\|\hat{g} - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta} (\hat{g}, g) = (g, \rho) + \delta \|g\|_{L^2(\Omega)}.$$

Sea ψ la solución del problema

$$\begin{cases} -\partial_t \psi + \mathcal{A}^* \psi = 0 & \text{en } Q \\ \psi = 0 & \text{sobre } \Sigma \\ \psi(\theta) = g, \end{cases} \quad (67)$$

donde \mathcal{A}^* es el operador adjunto de \mathcal{A} . Se puede verificar que $L^*f = \psi \chi_{\omega \times (0, \theta)}$, en efecto, se puede demostrar, utilizando fórmula de Green, que

$$(u[f](\theta), g)_{L^2(\Omega)} = \int_{\omega \times (0, \theta)} f \psi$$

Luego,

$$\inf_{f \in L^2(\omega \times (0, \theta))} (F_1(f) + F_2(Lf)) = - \inf_{g \in L^2(\Omega)} J_\rho^\delta(\psi_g) := \left(\frac{1}{2} \int_{\omega \times (0, \theta)} |\psi_g|^2 - (g, \rho) + \delta \|g\|_{L^2(\Omega)} \right), \quad (68)$$

donde ψ_g es solución del problema adjunto (67) asociado a g . Así, el problema dual consiste en minimizar el funcional J_ρ^δ sujeto al problema adjunto (67).

Observación .32 *El problema dual tiene solución única. Sea φ^0 su solución y φ la solución del problema adjunto (67) con $\varphi(\theta) = \varphi^0$. Luego, la solución del problema de control óptimo aproximado está dada por*

$$f = \varphi \chi_{\omega \times (0, \theta)}$$

Se busca establecer algoritmos constructivos para resolver el problema dual y así, gracias a lo último, encontrar la solución del problema primal, esto es, el de control óptimo aproximado.

Solución directa del problema dual

Sea $g \in L^2(\Omega)$, se define $[g] := \|\psi_g\|_{L^2(\omega \times (0, \theta))}$, donde ψ_g es la solución del problema (67) asociado a g . Se puede probar que $[\cdot]$ es norma en $L^2(\Omega)$. Sea φ^0 la solución del problema dual. Se tiene la siguiente desigualdad variacional

$$\begin{cases} \varphi^0 \in L^2(\Omega), \forall g \in L^2(\Omega), \\ \iint_{\omega \times (0, \theta)} \varphi(\psi_g - \varphi) dxdt - (\rho, g - \varphi^0) + \delta \|g\|_{L^2(\Omega)} - \delta \|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)} \geq 0 \end{cases} \quad (69)$$

La desigualdad anterior se puede reescribir como

$$\begin{cases} \varphi^0 \in L^2(\Omega), \\ [\varphi^0, g - \varphi^0] - (\rho, g - \varphi^0) + \delta \|g\|_{L^2(\Omega)} - \delta \|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)} \geq 0, \forall g \in L^2(\Omega), \end{cases} \quad (70)$$

donde el $[g, g'] = (\psi_g, \psi_{g'})_{L^2(\omega \times (0, \theta))}$. Se define ahora la solución de estado adjunta como la solución u del problema

$$\begin{cases} \partial_t u + \mathcal{A}u = \psi \chi_{\omega \times (0, \theta)} \text{ en } Q \\ u = 0 \text{ sobre } \Sigma \\ u(t = 0) = 0 \text{ en } \Omega. \end{cases} \quad (71)$$

Multiplicando la ecuación (71) por $\psi_g - \varphi$ e integrando sobre Q , se obtiene

$$\iint_{\omega \times (0, \theta)} \varphi(\psi_g - \varphi) = (u[f](\theta), g - \varphi^0) \quad (72)$$

Se define $\Lambda g := u_g[f](\theta)$, donde $u_g[f]$ es solución del problema (71) con $\psi = \psi_g$. De esta manera, el problema dual se puede reescribir como

$$\begin{cases} \varphi^0 \in L^2(\Omega); \\ (\Lambda \varphi^0, g - \varphi^0) - (\rho, g - \varphi^0) + \delta \|g\|_{L^2(\Omega)} - \delta \|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)} \geq 0, \forall g \in L^2(\omega) \end{cases}$$

Observación .33 *Notar que a partir de (72), $[g, g'] = (\Lambda g, g')$, $\forall g, g' \in L^2(\Omega)$. Así, $\Lambda \in \mathcal{L}(L^2(\Omega))$, $\Lambda = \Lambda^*$ y $\Lambda \geq 0$. Sigue que la (única) solución del problema dual es también la solución del siguiente problema:*

$$\inf_{g \in L^2(\Omega)} \left(\frac{1}{2} (\Lambda g, g) - (\rho, g) + \delta \|g\|_{L^2(\Omega)} \right) \quad (73)$$

Todo lo anterior se resume en el siguiente resultado.

Teorema .34 *1. Se tiene la siguiente igualdad:*

$$\inf_{\|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta} \frac{1}{2} \|f\|_{L^2(\omega \times (0, \theta))}^2 = - \inf_{g \in L^2(\Omega)} \left(\frac{1}{2} \iint_{\omega \times (0, \theta)} \psi_g^2 - (\rho, g) + \delta \|g\|_{L^2(\Omega)} \right)$$

$$\text{sujeto a } \begin{cases} -\partial_t \psi_g + \mathcal{A} \psi_g = 0 \text{ en } Q \\ \psi_g = 0 \text{ sobre } \Sigma \\ \psi_g(\theta) = g \in \Omega \end{cases} \quad (74)$$

2. La (única) solución φ^0 del problema dual (68) es solución del problema (73).
3. La (única) solución del problema primal está dada por $f = \varphi \chi_{\omega \times (0, \theta)}$, donde φ es solución de

$$\begin{cases} -\partial_t \varphi + \mathcal{A}^* \varphi = 0 & \text{en } Q \\ \varphi = 0 & \text{sobre } \Sigma \\ \varphi(\theta) = \varphi^0 & \text{en } \Omega \end{cases}$$

Observación .35 Sea φ_δ^0 la solución del problema de controlabilidad aproximada, luego, $\lim_{\delta \rightarrow 0} \varphi_\delta^0 = \varphi_0^0$ en $L^2(\Omega)$ (donde φ_0^0 es la solución del problema de control óptimo exacto) si y solo si $\rho \in (\overline{L^2(\Omega)^{[1]}})^*$, donde $\overline{L^2(\Omega)^{[1]}}$ es la completación de $L^2(\Omega)$ bajo la norma $[\cdot]$.

Argumentos de penalización

Se denota $B_{L^2(\Omega)}$ a la bola unitaria en $L^2(\Omega)$. La penalización consistirá en la restricción $\|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)^2} < \delta$. Una forma de realizar esta penalización es introduciendo un funcional suave sobre $L^2(\Omega)$, que se anule sobre $\rho + \delta B_{L^2(\Omega)}$ y que sea estrictamente positiva fuera de esta bola. Sea μ dicho funcional. Se considera el problema

$$\inf_{L^2(\omega \times (0, \theta))} \left(\frac{1}{2} \|f\|_{L^2(\omega \times (0, \theta))}^2 + k\mu(u[f](\theta, \cdot)) \right).$$

Otra posibilidad es introducir

$$J_k(f) := \frac{1}{2} \|f\|_{L^2(\omega \times (0, \theta))}^2 + \frac{k}{2} \|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)},$$

para k suficientemente grande (por determinar). Luego, se considera el siguiente problema:

$$\inf_{f \in L^2(\omega \times (0, \theta))} J_k(f)$$

Este problema tiene solución única, que se denotará como f_k . Se tiene el siguiente resultado:

Proposición .36 Para $\delta > 0$, existe k suficientemente grande tal que f_k satisface la desigualdad $\|u[f_k](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta$.

Observación .37 Notar que:

1. Para k dado, el sistema de optimalidad para el problema de minimización asociado a J_k es

$$\begin{cases} \partial_t u + \mathcal{A}u = \varphi \chi_{\omega \times (0, \theta)} & \text{en } Q \\ u = 0 & \text{sobre } \Sigma \\ u(t=0) = 0 \\ -\partial_t \varphi + \mathcal{A}^* \varphi = 0 \\ \varphi(\theta) = k(\rho - u(\theta)) \\ \varphi = 0 & \text{sobre } \Sigma \end{cases}$$

Notar además que $\varphi(\theta)$ es solución de la ecuación $(k^{-1}I + \Lambda)\varphi(\theta) = \rho$.

2. En general, para $\rho \in L^2(\Omega)$, el proceso no converge cuando $k \rightarrow \infty$. En ese caso, se tiene controlabilidad exacta en el límite.

Queda resolver el problema de minimización sobre J_k . Para ello se propone lo siguiente: El problema dual (68), se puede formular como

$$\begin{cases} \varphi^0 \in L^2(\Omega), \forall g \in L^2(\Omega) \\ (\Lambda\varphi^0, g - \varphi^0) - (\rho, g - \varphi^0) + \delta\|g\|_{L^2(\Omega)} - \delta\|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)} \geq 0 \end{cases} \quad (75)$$

Tomando $g = 0$ y $g = 2\varphi^0$,

$$(\Lambda\varphi^0, \varphi^0) + \delta\|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)}^2 = (\rho, \varphi^0)$$

Además, se tiene que

$$(k^{-1}I + \Lambda)\varphi^0 = \rho.$$

Aplicando (\cdot, φ^0) ,

$$(\Lambda\varphi^0, \varphi^0) + k^{-1}\|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)}^2 = (\rho, \varphi^0)$$

Así, de estas dos ecuaciones, se tiene que

$$k^{-1}\|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)}^2 = \delta\|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)},$$

por lo que se propone elegir $k = \frac{1}{\delta}\|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)}$. Considerando procesos iterativos para la resolución de φ^0 (escribiendo φ_n^0 para la n -ésima iteración), después de haber definido un k a priori, se toman sucesivamente, para cada n , $k_n = \frac{1}{\delta}\|\varphi_n^0\|_{L^2(\Omega)}$

Funciones de costo en $L^\infty(\Omega)$ y controles bang-bang

Se considera el mismo problema directo (61), siendo $u[f]$ su solución. Dado $\rho \in L^2(\Omega)$, se buscan aquellos controles f tales que $\|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta$. Ahora, se considera el siguiente problema de control óptimo:

$$\begin{aligned} & \inf_f \|f\|_{L^\infty(\omega \times (0, \theta))} \\ & \text{sujeto a } \|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta \end{aligned} \quad (76)$$

En general, se puede considerar $\inf_f \|f\|_{L^s(\omega \times (0, \theta))}$, con las mismas restricciones de antes y $s \in [1, +\infty]$ arbitrario. Si $s \in (1, +\infty)$, es conveniente usar la función de costo $f \mapsto s^{-1}\|f\|_{L^s(\omega \times (0, \theta))}^s$, por tener mejores propiedades de diferenciabilidad, sin alterar la solución del problema original.

En adelante, se consideran los problemas

$$\inf_f \frac{1}{2}\|f\|_{L^\infty(\omega \times (0, \theta))}^2 \quad (77)$$

$$\text{ó } \inf_f \frac{1}{2}\|f\|_{L^2(\omega \times (0, \theta))}^2 \quad (78)$$

A continuación, se expone un método de aproximación para $L^\infty(\omega \times (0, \theta))$.

Aproximación por penalización y regularización (I)

Se considera el problema

$$\inf_f J_k^s(f) := \frac{1}{2} \|f\|_{L^s(\omega \times (0, \theta))}^2 + \frac{1}{2} k \|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)}^2$$

La penalización está dada por $k > 0$ grande para forzar la condición $u[f](\theta, \cdot) = \rho$, y la regularización está dada por s , que también debe ser grande (pues se busca aproximar $s \rightarrow \infty$). El problema tiene solución única y su sistema de optimalidad está dado por

$$\begin{cases} \partial_t u + \mathcal{A}u = \|p\|_{L^{s'}(\omega \times (0, \theta))}^{2-s'} p |p|^{s'-2} \chi_{\omega \times (0, \theta)} & \text{en } Q \\ u = 0 & \text{sobre } \Sigma \\ u(t = 0) = 0 \\ -\partial_t p + \mathcal{A}^* p = 0 & \text{en } Q \\ p = 0 & \text{sobre } \Sigma \\ p(\theta) = k(\rho - u[f](\theta)) \end{cases}$$

Para s y k suficientemente grandes, donde $\frac{1}{s} + \frac{1}{s'} = 1$. En resumen, el último sistema de optimalidad tiene solución única y el control óptimo f está dado por $f = \|p\|_{L^{s'}(\omega \times (0, \theta))}^{2-s'} p |p|^{s'-2} \chi_{\omega \times (0, \theta)}$

Aproximación por penalización y regularización (II)

Se toma el límite $s \rightarrow \infty$ ($s' \rightarrow 1$) en el sistema de optimalidad de la sección anterior y f es solución para algún k fijo. Suponiendo $p \neq 0$ c.t.p. en Q , al tomar el límite, se obtiene el sistema

$$\begin{cases} \partial_t u + \mathcal{A}u = \|p\|_{L^1(\omega \times (0, \theta))} \operatorname{sgn}(p) \chi_{\omega \times (0, \theta)} & \text{en } Q \\ u = 0 & \text{sobre } \Sigma \\ u(t = 0) = 0 \\ -\partial_t p + \mathcal{A}^* p = 0 & \text{en } Q \\ p = 0 & \text{sobre } \Sigma \\ p(\theta) = k(\rho - u[f](\theta)) \end{cases}$$

Así, el control óptimo es $f = \|p\|_{L^1(\omega \times (0, \theta))} \operatorname{sgn}(p) \chi_{\omega \times (0, \theta)}$, lo que corresponde a un resultado tipo bang-bang.

A partir de la elección del problema con norma L^2 en (77), se obtienen problemas regularizados y regularizados-penalizados.

Para el caso con norma L^s , se puede usar dualidad como en el caso con norma L^2 , y tomando $s = \infty$ (y con esto, $s' = 1$), se obtiene el problema dual

$$\inf_{f \in L^\infty(\omega \times (0, \theta))} \left(\frac{1}{2} \|f\|_{L^\infty(\omega \times (0, \theta))}^2 + \frac{1}{2} k \|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \quad (79)$$

El objetivo ahora es lograr la desigualdad $\|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta$. Usando la formulación de penalización, se obtiene $u[f](\theta, \cdot)$ cerca de ρ . Para que $u[f](\theta, \cdot)$ satisfaga lo que se busca, se debe escoger k adecuado. Notar en primer lugar que el problema dual está dado por

$$\inf_g \left(\frac{1}{2} \|\psi_g\|_{L^{s'}(\Omega)}^2 + \frac{1}{2k} \|g\|_{L^2(\Omega)}^2 - (\rho, g) \right)$$

Para el problema de control dado por la norma $L^s(\omega \times (0, \theta))$, el dual asociado es

$$\inf_{g \in L^2(\Omega)} \left(\frac{1}{2} \|\psi_g\|_{L^{s'}(\Omega)}^2 + \delta \|g\|_{L^2(\Omega)} - (\rho, g) \right)$$

Similar a lo que se hizo en los argumentos de penalización para el caso en $L^2(\Omega)$, se puede deducir que $k = \frac{1}{\delta} \|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)}$, donde φ^0 es solución del problema dual. Esto sugiere el siguiente enfoque para resolver el problema de control asociado a $L^{s'}(\omega \times (0, \theta))$: Suponer un procedimiento iterativo que encuentre φ_n^0 para cada n . Luego, definir $k_n = \frac{1}{\delta} \|\varphi_n^0\|_{L^2(\Omega)}$.

Métodos numéricos

Sea $\mathcal{U} := \{f \in L^2(\omega \times (0, \theta)) : \|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)} < \delta\}$, se considera el problema de control

$$\inf_{f \in \mathcal{U}} \frac{1}{2} \|f\|_{L^2(\omega \times (0, \theta))}^2 \quad (80)$$

Una variante de este problema, es el siguiente:

$$\inf_{f \in L^2(\omega \times (0, \theta))} \left(\frac{1}{2} \|f\|_{L^2(\omega \times (0, \theta))}^2 + \frac{k}{2} \|u[f](\theta, \cdot) - \rho\|_{L^2(\Omega)} \right) \quad (81)$$

Este problema tiene solución única.

La solución de los problemas (80) y (81) puede alcanzarse por métodos que actúan directamente sobre el control f . Estos métodos pueden generalizarse a problemas no lineales (en principio al menos). En ambos, la ecuación de estado correspondiente es lineal y la función de costo es cuadrática. En vez de resolver estos problemas directamente, se pueden resolver problemas equivalentes obtenidos al aplicar, por ejemplo, Teoría de Dualidad Convexa. Los problemas duales se pueden ver como problemas de identificación para el dato final de la ecuación adjunta (reversa en el tiempo). Estos problemas duales son útiles para los cálculos numéricos.

El problema dual de (80) se define por la siguiente desigualdad variacional:

$$\begin{cases} \varphi^0 \in L^2(\Omega), \forall g \in L^2(\Omega) \\ (\Lambda \varphi^0, g - \varphi^0) + \delta \|g\|_{L^2(\Omega)} - \delta \|\varphi^0\|_{L^2(\Omega)} \geq (\rho - u^0(\theta), g - \varphi^0) \end{cases}$$

y (81) se define por la ecuación

$$(k^{-1}I + \Lambda)\varphi^0 = \rho - u^0(\theta),$$

donde $u^0(\theta)$ es la solución del sistema con $f = 0$.

Para la resolución de estos problemas, se combinará el Método del Gradiente Conjugado con Método de Diferencias Finitas para la variable temporal y Método de Elementos Finitos para la espacial.

Método del Gradiente Conjugado (GC)

La ecuación $(k^{-1}I + \Lambda)\varphi^0 = \rho - u^0(\theta)$ se puede escribir variacionalmente como

$$\begin{cases} \varphi^0 \in L^2(\Omega) \\ k^{-1}(\varphi^0, g) + (\Lambda\varphi^0, g) = (\rho - u^0(\theta), g), \forall g \in L^2(\Omega) \end{cases}$$

El problema variacional es un caso particular del problema variacional abstracto

$$\begin{cases} u \in V \\ a(u, v) = L(v), \forall v \in V, \end{cases}$$

donde V es un espacio de Hilbert, $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ es bilineal, continua, simétrica, elíptica, y $L \in V^*$. Por el Teorema de Lax-Milgram, el problema tiene solución única. Este problema se puede resolver con el algoritmo del GC:

Algoritmo .38 (*Gradiente Conjugado, forma abstracta*):

Paso 0: *Inicialización*

- $u^0 \in V$ dado y $\eta > 0$ pequeño.
- Resolver $g^0 \in V$, $(g^0, v) = a(u^0, v) - L(v), \forall v \in V$
- Si $\frac{\|g^0\|}{\|u^0\|} \leq \eta$, asignar $u = u^0$. Si no:
- Asignar $w^0 = g^0$. Y para $n \geq 0$, u^n, g^n y w^n conocidos ($g^n, w^n \neq 0$), se calculan u^{n+1}, g^{n+1} y si es necesario, w^{n+1} con los siguientes pasos.

Paso 1: *Máximo descenso*

- Calcular $\rho_n = \frac{\|g^n\|^2}{a(w^n, w^n)}$, tomar $u^{n+1} = u^n - \rho_n w^n$.
- Resolver $g^{n+1} \in V$, $(g^{n+1}, v) = (g^n, v) - \rho_n a(w^n, v), \forall v \in V$.

Paso 2: *Prueba de convergencia y construcción de la nueva dirección de descenso.*

- Si $\frac{\|g^{n+1}\|}{\|g^0\|} < \eta$, asignar $u = u^{n+1}$. Si no:
- Calcular $\gamma_n = \frac{\|g^{n+1}\|^2}{\|g^n\|^2}$, $w^{n+1} = g^{n+1} + \gamma_n w^n$.
- Actualizar $n = n + 1$ y volver al Paso 1.

El éxito del método del GC se debe a sus buenas propiedades de convergencia, en efecto, se puede probar que:

1. Si $\delta = 0$, entonces $\lim_{n \rightarrow \infty} \|u^n - u\|_{L^2(\Omega)} = 0, \forall u^0 \in V$, donde u es la solución del problema variacional general.
2. Si $\delta = 0$ y $\dim(V) = N < \infty$, e ignorando los errores de redondeo, el algoritmo goza de la propiedad de terminación finita, es decir, existe $n_0 \leq N$ tal que $u^{n_0} = u$. Se puede cuantificar el resultado de convergencia:

$$\|u^n - u\|_a \leq 2\|u^0 - u\|_a \left(\frac{\sqrt{\nu_a} - 1}{\sqrt{\nu_a} + 1} \right)^n,$$

donde $\|\cdot\|_a = \sqrt{a(\cdot, \cdot)}$ y $\nu_a = \|A\| \|A^{-1}\|$ es el número de condicionamiento de a , donde $A \in \mathcal{L}(V)$ es el operador dado por $(Av, w) = a(v, w), \forall v, w \in V$.

Se aplicará este método para encontrar la solución φ^0 de la ecuación

$$(k^{-1}I + \Lambda)\varphi^0 = \rho - u^0(\theta). \quad (82)$$

Se obtiene el siguiente algoritmo:

Algoritmo .39 (*Gradiente Conjugado, aplicación para resolver la ecuación (82)*)

Paso 0: *Inicialización*

- $\varphi_0 \in L^2(\Omega)$ dado.
- *Resolver el problema*

$$\begin{cases} -\partial_t p^0 + \mathcal{A}^* p^0 = 0 \text{ en } Q \\ p^0 = 0 \text{ sobre } \Sigma \\ p^0(\theta) = \varphi_0 \end{cases}$$

- Definir $f^0 = p^0 \chi_{w \times (0, \theta)}$
- *Resolver*

$$\begin{cases} \partial_t u^0 + \mathcal{A} u^0 = f^0 \text{ en } Q \\ u^0 = 0 \text{ sobre } \Sigma \\ u^0(t=0) = u_0 \end{cases}$$

- Calcular $g^0 = k^{-1}\varphi_0 + u^0(\theta) - \rho$
- Si $\frac{\|g^0\|_{L^2(\Omega)}}{\|\varphi_0\|_{L^2(\Omega)}} < \eta$, tomar $u = u^0$ y $f = f^0$.
- Si no, definir $w^0 = g^0$. Para cada $n \geq 0$, u^n, g^n, w^n conocidos, calcular $u^{n+1}, g^{n+1}, w^{n+1}$ con los siguientes pasos.

Paso 1: *Máximo descenso*

- Resolver

$$\begin{cases} -\partial_t \bar{p}^n + \mathcal{A}^* \bar{p}^n = 0 & \text{en } Q \\ \bar{p}^n = 0 & \text{sobre } \Sigma \\ \bar{p}^n(\theta) = w^n \end{cases}$$

- Definir $\bar{f}^n = \bar{p}^n \chi_{\omega \times (0, \theta)}$.

- Resolver

$$\begin{cases} \partial_t \bar{u}^n + \mathcal{A} \bar{u}^n = \bar{f}^n & \text{en } Q \\ \bar{u}^n = 0 & \text{sobre } \Sigma \\ \bar{u}^n(t=0) = 0 \end{cases}$$

- Calcular $\bar{g}^n = k^{-1}w^n + \bar{u}^n(\theta)$, $\rho_n = \frac{\|g^n\|_{L^2(\Omega)}}{\int_{\Omega} \bar{g}^n w^n}$, $u^{n+1} = u^n - \rho_n w^n$, $g^{n+1} = g^n - \rho_n \bar{g}^n$.

Paso 2: *Prueba de convergencia y construcción de la nueva dirección de descenso.*

- Si $\frac{\|g^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}}{\|g^n\|_{L^2(\Omega)}} < \eta$, tomar $u = u^{n+1}$ y resolver la ecuación (67) con $g = u$ para obtener $f = \psi \chi_{\omega \times (0, \theta)}$ como solución del problema (81).
- Si la prueba de convergencia no se satisface, calcular $\gamma_n = \frac{\|g^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2}{\|g^n\|_{L^2(\Omega)}}$, $w^{n+1} = g^{n+1} + \gamma_n w^n$.
- Actualizar $n = n + 1$ y volver al Paso 1 (es decir, la resolución de \bar{p}^n).

Observación .40 *Se puede probar que $\|k^{-1}I + \Lambda\| = k^{-1} + \|\Lambda\|$ y $\|(k^{-1}I + \Lambda)^{-1}\| = k$. Luego, el número de condicionamiento de la forma bilineal de la formulación variaiconal es $\|\Lambda\|k + 1$. De esto, se espera que el número de iteraciones suficientes para alcanzar la convergencia varía como $\sqrt{k} \ln\left(\frac{k^{3/4}}{\sqrt{\eta}}\right)$, para valores suficientemente grandes de k .*

Discretización temporal

Para discretizar la ecuación $(k^{-1}I + \Lambda)\varphi^0 = \rho - u^0(\theta)$, el punto crucial es aproximar el operador Λ . Suponiendo que \mathcal{A} es independiente de t , se introduce el paso de discretización como $\Delta t = T/N$, para algún $N \in \mathbb{N}$. Usando un esquema de Euler implícito, la ecuación reversa se puede aproximar como sigue:

En primer lugar, se toma $\psi^{N+1} = g$, $g \in L^2(\Omega)$. Suponiendo ψ^{n+1} conocido, se resuelve el problema de Dirichlet para $n = N, N - 1, \dots, 1$:

$$\begin{cases} -\frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} + \mathcal{A}^* \psi^n = 0 & \text{en } \Omega \\ \psi^n = 0 & \text{sobre } \Gamma, \end{cases} \quad (83)$$

donde $\psi^n(x) \approx \psi(x, n\Delta t)$. Luego, se aproxima la ecuación de estado adjunta (71) como ϕ^0 . Suponiendo ϕ^{n-1} conocido, se resuelve el problema de Dirichlet para $n = 1, \dots, N$:

$$\begin{cases} \frac{\phi^n - \phi^{n-1}}{\Delta t} + \mathcal{A}\phi^n = \psi^n \chi_{\omega \times (0, \theta)} & \text{en } \Omega \\ \phi^n = 0 & \text{sobre } \Gamma \end{cases}$$

A continuación, se aproxima $\Lambda^{\Delta t}$ definido como $\Lambda^{\Delta t}g = \phi^N$. De las propiedades elípticas de \mathcal{A} y \mathcal{A}^* , los problemas de Dirichlet discretizados tienen solución única. Se puede probar además que el operador $\Lambda^{\Delta t} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ es simétrico, semidefinido positivo. Luego, se calcula el análogo discreto de $u^0 (= u[f = 0])$ mediante: $u^{0,0} = u_0$ y para $n = 1, \dots, N$, conociendo $u^{0,n-1}$, se resuelve el problema elíptico (bien puesto):

$$\begin{cases} \frac{u^{0,n} - u^{0,n-1}}{\Delta t} + \mathcal{A}u^{0,n} = 0 & \text{en } \Omega \\ u^{0,n} = 0 & \text{sobre } \Gamma \end{cases}$$

Finalmente, el problema aproximado (con respecto al tiempo) es

$$\begin{cases} \varphi^{\Delta t} \in L^2(\Omega) \\ (k^{-1}\varphi^{\Delta t} + \Lambda^{\Delta t}\varphi^{\Delta t}, g)_{L^2(\Omega)} = (\rho - u^{0,N}, g)_{L^2(\Omega)}, \forall g \in L^2(\Omega) \end{cases}$$

Discretización completa

Para la discretización completa del problema $(k^{-1} + \Lambda)\varphi^0 = \rho - u^0(\theta)$, se considera por simplicidad que Ω y $\omega \subset \mathbb{R}^2$ son polígonos (si no lo fueran, se podrían aproximar por polígonos). Se introduce una primera triangulación de elementos finitos \mathcal{T}_h de Ω . $\bar{\Omega}$ y $\bar{\omega}$ son uniones de triángulos de \mathcal{T}_h . Se aproxima $H^1(\Omega)$, $L^2(\Omega)$ y $H_0^1(\Omega)$ por los siguientes espacios de dimensión finita:

$$\begin{aligned} V_h &= \{z_h \in C^0(\bar{\Omega}) : z_h|_T \in \mathcal{P}^1, \forall T \in \mathcal{T}_h\} \\ V_{0,h} &= \{z_h \in V_h : z_h|_\Gamma = 0\} \quad (= V_h \cap H_0^1(\Omega)) \end{aligned}$$

Se introduce una segunda triangulación \mathcal{T}_H de Ω . Podría eventualmente considerarse $\mathcal{T}_H = \mathcal{T}_h$, pero la gracia es que \mathcal{T}_H puede ser también más gruesa. Se asocia a \mathcal{T}_H los siguientes espacios:

$$\begin{aligned} E_H &= \{g \in C^0(\bar{\Omega}) : g|_T \in \mathcal{P}_1, \forall T \in \mathcal{T}_H\} \\ E_{0,H} &= \{g \in E_H : g|_\Gamma = 0\} \quad (= E_H \cap H_0^1(\Omega)) \end{aligned}$$

Como $H_0^1(\Omega)$ es denso en $L^2(\Omega)$ con norma $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$, se puede utilizar V_h o $V_{0,h}$ (resp. E_H p $E_{0,H}$) para aproximar $L^2(\Omega)$.

Se considera $a : H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ definido por $a(u, v) = \langle \mathcal{A}u, v \rangle, \forall u, v \in H_0^1(\Omega)$, donde el producto de dualidad $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es entre los espacios $H^{-1}(\Omega)$ y $H_0^1(\Omega)$. Similarmente, $a(v, u) = \langle \mathcal{A}^*u, v \rangle$. Por continuidad y elipticidad del operador \mathcal{A} , a es bicontinua y coercitiva. Se puede aproximar la ecuación $(k^{-1}I + \Lambda)\varphi^0 = \rho - u^0(\theta)$ por

$$(P_{hH}^{\Delta t}) : \begin{cases} \varphi_{hH}^{\Delta t} \in E_{0,H}, \forall g \in E_{0,H}, \\ \int_{\Omega} (k^{-1}\varphi_{hH}^{\Delta t} + \Lambda_{hH}^{\Delta t}\varphi_{hH}^{\Delta t})g = \int_{\Omega} (\rho - u_h^{0,N})g, \end{cases}$$

donde $u_h^{0,N}$ se obtiene de la discretización completa de u^0 : $u_{0h}^0 = u_{0h}$ con $u_{0h} \in V_h$ la aproximación de u^0 . Para $n = 1, \dots, N$, suponiendo $u_h^{0,n-1}$ conocido, calcular u_{0h}^n como la solución del problema elíptico (aproximadamente bien puesto):

$$\begin{cases} u_{0h}^n \in V_{0,h} \\ \int_{\Omega} \frac{u_{0h}^n - u_{0h}^{n-1}}{\Delta t} z + a(u_{0h}^n, z) = 0, \forall z \in V_{0,h} \end{cases}$$

El operador $\Lambda_{hH}^{\Delta t}$ se define como $\Lambda_{hH}^{\Delta t} g = \phi_h^N, \forall g \in E_{0,H}$, donde, para calcular ϕ_h^n se resuelven secuencialmente dos problemas parabólicos discretos: El primero consiste en establecer $\psi_h^{N+1} = g$. Luego, para $n = N, N-1, \dots, 1$, se calcula ψ_h^n a partir de ψ_h^{n+1} resolviendo el problema de Dirichlet discreto:

$$\begin{cases} \psi_h^n \in V_{0,h} \\ \int_{\Omega} \frac{\psi_h^n - \psi_h^{n+1}}{\Delta t} z + a(z, \psi_h^n) = 0, \forall z \in V_{0,h} \end{cases}$$

El segundo problema consiste en establecer $\phi_h^0 = 0$. Luego, para $n = 1, \dots, N$, se calcula ϕ_h^n a partir de ϕ_h^{n-1} a través de la solución del siguiente problema de Dirichlet:

$$\begin{cases} \phi_h^n \in V_{0,h} \\ \int_{\Omega} \frac{\phi_h^n - \phi_h^{n-1}}{\Delta t} z + a(\phi_h^n, z) = \int_{\omega} \psi_h^n z, \forall z \in V_{0,h} \end{cases}$$

Ambos problemas elípticos discretos tienen solución única. Se puede probar que

$$\int_{\Omega} (\Lambda_{hH}^{\Delta t} g) \tilde{g} = \Delta t \sum_{n=1}^N \int_{\omega} \psi_h^n \tilde{\psi}_h^n, \forall g, \tilde{g} \in E_{0,H},$$

lo que prueba que el operador $\Lambda_{hH}^{\Delta t}$ es simétrico y semidefinido positivo. Esto implica que el problema $(P_{hH}^{\Delta t})$ tiene solución única y se puede resolver mediante el método de Gradiente Conjugado.

Soluciones iterativas

A continuación, se expone una descripción del algoritmo para resolver $(P_{hH}^{\Delta t})$. Por simplicidad, se ignorarán los sub y superíndices $h, H, \Delta t$ de $\varphi_{hH}^{\Delta t}$.

Algoritmo .41 (*Gradiente Conjugado, para el problema completamente discretizado*)

Paso 0: Inicialización.

- $\varphi_0 \in E_{0,H}$ dado
- Suponiendo p_0^{n+1} conocido, resolver el problema (bien puesto) de Dirichlet para $n = N, N-1, \dots, 1$:

$$\int_{\Omega} \frac{p_0^n - p_0^{n+1}}{\Delta t} z + a(z, p_0^n) = 0, \forall z \in V_{0,h}, (p_0^n \in V_{0,h})$$

donde $p_0^{N+1} = \varphi_0$.

- Definir $f_0^n = p_0^n|_\omega$.
- Suponiendo u_0^{n-1} conocido, resolver el siguiente problema de Dirichlet (bien puesto) para $n = 1, \dots, N$:

$$\int_{\Omega} \frac{u_0^n - u_0^{n-1}}{\Delta t} z + a(u_0^n, z) = \int_{\omega} f_0^n z, \forall z \in V_{0,h}, (u_0^n \in V_{0,h}),$$

donde $u_0^0 = u_{0h}$.

- A continuación, se resuelve el problema variacional: Encontrar $g_0 \in E_{0,H}$ tal que

$$\int_{\Omega} g_0 g = \int_{\Omega} (k^{-1} f_0^N + u_0^N - \rho) g, \forall g \in E_{0,H}.$$

- Definir $w_0 = g_0$.
- Luego, para $m \geq 0$, suponiendo φ_m, g_m, w_m conocidos, calcular $\varphi_{m+1}, g_{m+1}, w_{m+1}$ como sigue:

Paso 1: Máximo descenso.

- Suponiendo \bar{p}_m^{n+1} conocido, resolver para $n = N, N-1, \dots, 1$ los siguientes problemas: Encontrar $\bar{p}_m^n \in V_{0,h}$ tal que

$$\int_{\Omega} \frac{\bar{p}_m^n - \bar{p}_m^{n+1}}{\Delta t} z + a(z, \bar{p}_m^n) = 0, \forall z \in V_{0,h},$$

donde $\bar{p}_m^{N+1} = w_m$.

- Definir $\bar{f}_m^n = \bar{p}_m^n|_\omega$.
- Suponiendo \bar{u}_m^{n-1} conocido, resolver para $n = 1, \dots, N$ los siguiente problemas bien puestos: Encontrar $\bar{u}_m^n \in V_{0,h}$ tal que

$$\int_{\Omega} \frac{\bar{u}_m^n - \bar{u}_m^{n-1}}{\Delta t} z + a(\bar{u}_m^n, z) = \int_{\omega} \bar{f}_m^n z, \forall z \in V_{0,h},$$

donde $\bar{u}_m^0 = 0$.

- A continuación, se resuelve el problema variacional: encontrar $\bar{g}_m \in E_{0,H}$ tal que

$$\int_{\Omega} \bar{g}_m g = \int_{\Omega} (k^{-1} w_m + \bar{u}_m^N) g, \forall g \in E_{0,H}.$$

- Calcular $\rho_m = \frac{\int_{\Omega} |g_m|^2}{\int_{\Omega} \bar{g}_m w_m}$.
- Calcular $\varphi_{m+1} = \varphi_m - \rho_m w_m$.

Paso 2: Prueba de convergencia y construcción de la nueva dirección de descenso.

- Calcular $g_{m+1} = g_m - \rho_m \bar{g}_m$.
- Si $\frac{\|g_{m+1}\|_{L^2(\Omega)}}{\|g_0\|_{L^2(\Omega)}} \leq \eta$, tomar $u = u_{m+1}$ y resolver el problema reverso en tiempo (83) (encontrar $\psi_h^n \in V_{0,h}$) con $g = u$ para obtener $f^n = \psi^n \chi_\omega$, para $n = 1, \dots, N$.
- Si no, definir $\gamma_m = \frac{\|g_{m+1}\|_{L^2(\Omega)}^2}{\|g_m\|_{L^2(\Omega)}^2}$.
- Calcular $w_{m+1} = g_{m+1} + \gamma_m w_m$.
- Actualizar $m = m + 1$. Volver al Paso 1 (es decir, la resolución de \bar{p}^n).

C. Idea de aplicación para el proyecto de LIS

Esta sección del anexo consiste en aplicar lo estudiado en los Capítulos 2 y 3 a los problemas que motivaron esta tesis, esto es, los problemas inversos provenientes de los modelos hidrodinámicos y de transporte que representan fenómenos presentes en el proyecto de lixiviación in situ (LIS) introducidos en el Capítulo 1.

Cabe mencionar que los modelos están relacionados de manera secuencial, ya que la solución de los problemas inversos y directos del modelo hidrodinámico permiten definir una de las componentes del modelo de transporte. Por esta razón, no es casualidad que en este capítulo se aplican los resultados en ese orden.

Problema hidrodinámico

Como se vio en el Capítulo 1, el problema hidrodinámico consiste en recuperar el tensor de conductividad hidráulica proveniente de las leyes de Darcy, en sus versiones estacionarias o transientes. Primero se verá el caso estacionario y después el transiente.

Modelo de Darcy estacionario

El movimiento de un fluido con número de Reynolds bajo a través de un medio poroso se puede modelar mediante un problema de Stokes multiescala, donde la escala microscópica está dada por las porosidades del medio. El modelo de Darcy estacionario proviene de homogeneizar este modelo (ver, por ejemplo, [7, 21]). En otras palabras, el modelo de Darcy es una descripción macroscópica del movimiento de un fluido a través de un medio poroso. El modelo de Darcy estacionario se puede plantear como: encontrar la velocidad del fluido \mathbf{u} y la presión p tales que

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \frac{1}{\mu} K(\mathbf{f} - \nabla p) \text{ en } \Omega \\ \operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0 \text{ en } \Omega \\ p = p^b \text{ sobre } \partial\Omega, \end{cases} \quad (84)$$

donde $\mu > 0$ es el coeficiente de viscosidad cinemática del fluido, K es el tensor de conductividad hidráulica del medio obtenida a partir de las soluciones de los problemas celda asociados a la homogeneización del problema de Stokes multiescala mencionado (ver referencias mencionadas anteriormente para más detalles). Este tensor es simétrico y definido positivo (ver [31, 18]). $\mathbf{f} \in (L^2(\Omega))^d$ es una fuerza externa actuando sobre la unidad de masa del fluido, $p^b \in H^{1/2}(\partial\Omega)$ es una tensión externa.

Aplicando la segunda ecuación en (84) a la primera, el modelo de Darcy estacionario se puede escribir como: encontrar la presión del fluido p tal que

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(K\nabla p) = Q \text{ en } \Omega \\ p = p^b \text{ sobre } \partial\Omega, \end{cases} \quad (85)$$

donde $Q := -\operatorname{div}(K\mathbf{f})$. $Q \in H^{-1}(\Omega)$ se puede considerar arbitrario si se impone las siguientes hipótesis:

Hipótesis .42 (*Condiciones sobre K y \mathbf{f}*)

1. Existe $g \in H_0^1(\Omega)$, $\mathbf{f} = \nabla g$. Esto es, \mathbf{f} es un campo conservativo.
2. $K \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$

Notar que la segunda hipótesis sólo agrega la condición de elipticidad sobre K , pues la condición de ser simétrica ya la satisface por ser tensor de conductividad hidráulica.

Para probar que $Q \in H^{-1}(\Omega)$ se puede tomar arbitrariamente, se debe demostrar que la aplicación $T : V \rightarrow H^{-1}(\Omega)$ definida por

$$T(\mathbf{f}) = -\operatorname{div}(K\mathbf{f})$$

es sobreyectiva, donde $V := \{\mathbf{f} \in (L^2(\Omega))^d \mid \text{existe } g \in H_0^1(\Omega), \mathbf{f} = \nabla g\}$. Para ello, en primer lugar notar que V es un espacio de Hilbert. En efecto, es un subespacio de $(L^2(\Omega))^d$, por lo que sólo basta ver que es cerrado bajo su norma. Sea $(\mathbf{f}_n)_n \subset V$ una sucesión que converge a cierto \mathbf{f} en $(L^2(\Omega))^d$. Luego, para cada $n \in \mathbb{N}$, existe $g_n \in H_1(\Omega)$ tal que $\mathbf{f}_n = \nabla g_n$. Como la sucesión $(\mathbf{f}_n)_n$ es acotada en $(L^2(\Omega))^d$ (pues es convergente), entonces también lo será la sucesión ∇g_n . Utilizando la desigualdad de Poincaré, se puede demostrar que la sucesión $(g_n)_n$ es acotada en $H_0^1(\Omega)$. Luego, por reflexividad, $(g_n)_n$ posee una subsucesión $(g_{n'})_{n'}$ que converge en $\|\cdot\|_{H^1(\Omega)}$ a cierto $g \in H_0^1(\Omega)$. Esto es,

$$\|g_{n'} - g\|_{H^1(\Omega)} \rightarrow 0 \text{ cuando } n' \rightarrow \infty.$$

Luego,

$$\|\mathbf{f}_{n'} - \nabla g\|_{(L^2(\Omega))^d} = \|\nabla g_{n'} - \nabla g\|_{(L^2(\Omega))^d} \leq \|g_{n'} - g\|_{H^1(\Omega)} \rightarrow 0.$$

Sigue que $\mathbf{f}_{n'} \rightarrow \nabla g$ cuando $n' \rightarrow \infty$ en $(L^2(\Omega))^d$. Pero como la sucesión original $(\mathbf{f}_n)_n$ converge completamente, entonces todas sus subsucesiones convergen al mismo límite, por lo que $\mathbf{f}_n \rightarrow \nabla g$ en $(L^2(\Omega))^d$. Así, $\mathbf{f} = \nabla g$ y se concluye que V es cerrado en $(L^2(\Omega))^d$, y por lo tanto, es un espacio de Hilbert.

Ahora se está en condiciones de probar que la aplicación $T : V \rightarrow H^{-1}(\Omega)$ es sobreyectiva. Sea $Q \in H^{-1}(\Omega)$, se busca \mathbf{f} tal que $T(\mathbf{f}) = Q$, esto es,

$$-div(K\mathbf{f}) = Q,$$

o bien, se busca $g \in H_0^1(\Omega)$ tal que

$$-div(K\nabla g) = Q.$$

La existencia de dicho g está garantizada por el Teorema de Lax-Milgram (utilizando el hecho de que $K \in \mathcal{M}(\alpha, \beta, \Omega)$). Así basta tomar $\mathbf{f} = \nabla g$, con lo que se demuestra la sobreyectividad del operador T . Con esto, se puede tomar $Q \in H^{-1}(\Omega)$ arbitrario en el planteamiento del modelo de Darcy en (85).

Ahora, para escribir el problema (85) con condición de borde nula, basta definir $\tilde{p} := p - \tilde{p}^p$, donde $\tilde{p}^p \in H^1(\Omega)$ con $\tilde{p}^p|_{\partial\Omega} = p^b$, se puede comprobar fácilmente que $-div(K\nabla\tilde{p}) = \tilde{Q}$ en Ω y $\tilde{p} = 0$ sobre $\partial\Omega$, donde $\tilde{Q} := Q - div(K\nabla\tilde{p}^b)$. Argumentando de manera similar a como se hizo anteriormente, $\tilde{Q} \in H^{-1}(\Omega)$ se puede elegir arbitrariamente. Así, para estudiar el problema (85), basta con estudiar el problema

$$\begin{cases} -div(K\nabla p) = Q \text{ en } \Omega \\ p = 0 \text{ sobre } \partial\Omega. \end{cases} \quad (86)$$

Finalmente, la presión p se relaciona con la carga hidráulica h de la siguiente manera: $p = \rho gh$, donde ρ es la densidad del fluido y g la aceleración de gravedad. Con esto, el problema (85) se puede escribir en términos de la carga hidráulica:

$$\begin{cases} -div(K\nabla h) = Q \text{ en } \Omega \\ h = 0 \text{ sobre } \partial\Omega. \end{cases} \quad (87)$$

Modelo de Darcy estacionario multiescala

Como se dijo al inicio de esta sección, el modelo de Darcy proviene de homogeneizar un problema de Stokes multiescala, donde la escala microscópica está dada por las porosidades del medio y de donde resulta el tensor efectivo de conductividad hidráulica K . Ahora bien, este tensor K , a su vez, puede presentar altas oscilaciones a nivel microscópico, por lo que en estos casos conviene plantear el problema (87) como el siguiente problema multiescala:

$$\begin{cases} -div(K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon) = Q \text{ en } \Omega \\ h_\sigma^\varepsilon = 0 \text{ sobre } \partial\Omega, \end{cases} \quad (88)$$

donde ε representa la escala microscópica en la que ocurren las altas oscilaciones del tensor K^ε . Se suponen las Hipótesis 1.2 sobre K^ε , de manera que para conocer el tensor K^ε , baste conocer cierto escalar $\sigma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ que lo defina, esto es, $K^\varepsilon = K_\sigma^\varepsilon$. Así, para estimar el tensor K_σ^ε que define al problema (88) se puede proceder como en el Capítulo 2, si se tuvieran las mediciones del flujo en el borde $K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon|_{\partial\Omega}$.

Aplicación del modelo de Darcy estacionario multiescala para el problema hidrodinámico en el proyecto de LIS

El dominio en el que se realiza la lixiviación in situ es una porción del subsuelo. A este dominio se le hacen perforaciones, ya que la solución para el proceso de lixiviación debe inyectarse a través de pozos, y el mineral extraído mediante lixiviación se recupera a través de pozos de extracción. Otras perforaciones corresponden a pozos de observación o monitoreo, utilizados para obtener mediciones directas necesarias para el estudio del subsuelo.

Así, la porción del subsuelo Ω se puede modelar como un paralelepípedo de altura $H > 0$, y de ancho y largo d con perforaciones de radio $r > 0$. Para escribirlo explícitamente, se define Ω_1 como el paralelepípedo parametrizado como

$$\Omega_1 := [-d/2, d/2]^2 \times [-L, 0].$$

Los cilindros correspondientes a los pozos de extracción $\{E_i\}_{i=1}^{n_E}$ se escriben como

$$E_i := \{(x, y, z) \in \Omega_1 : (x - x_i^E)^2 + (y - y_i^E)^2 \leq r^2\},$$

para ciertos $(x_i^E, y_i^E) \in \Omega_1$. De igual forma, los cilindros correspondientes a los pozos de inyección se escriben como $\{I_i\}_{i=1}^{n_I}$, dados por

$$I_i := \{(x, y, z) \in \Omega_1 : (x - x_i^I)^2 + (y - y_i^I)^2 \leq r^2\},$$

para ciertos $(x_i^I, y_i^I) \in \Omega_1$. Finalmente, los pozos de observación se denotan como los $\{O_i\}_{i=1}^{n_O}$ dados por

$$O_i := \{(x, y, z) \in \Omega_1 : (x - x_i^O)^2 + (y - y_i^O)^2 \leq r^2\},$$

para ciertos $(x_i^O, y_i^O) \in \Omega_1$. Notar que por simplicidad se han considerado los radios de todos los cilindros iguales, pero también se podrían considerar radios distintos, en cuyo caso debería denotarse r_i para cada i . Se definen ahora

$$E := \cup_{i=1}^{n_E} E_i$$

$$I := \cup_{i=1}^{n_I} I_i$$

$$O := \cup_{i=1}^{n_O} O_i$$

$$P := E \cup I \cup O.$$

Esto es, P corresponde a todos los cilindros que representan a los pozos en la zona de lixiviación. Finalmente, el dominio correspondiente a la zona de lixiviación perforada es

$$\Omega = \Omega_1 \setminus P.$$

Ejemplo .43 Si $n_E = n_O = 4$, y $n_I = 1$, entonces se puede considerar una configuración de pozos como la que se ve en las siguientes figuras:

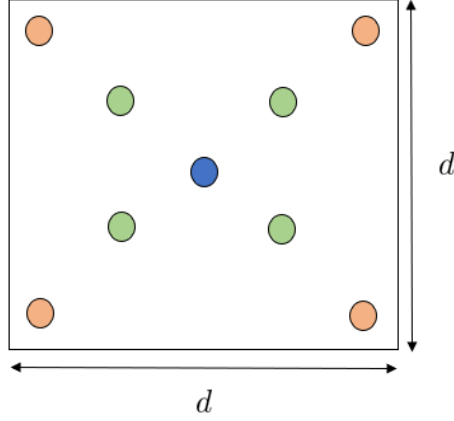


Figura 3: Vista superior del dominio Ω . Las porciones de en la zona de lixiviación de los pozos de extracción $\{E_i\}_{i=1}^4$ corresponden a los cilindros anaranjados, del pozo de inyección I al cilindro azul, y de los pozos de observación $\{O_i\}_{i=1}^4$ a los cilindros verdes.

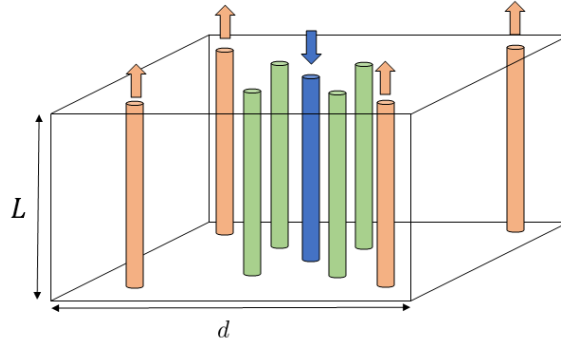


Figura 4: Visualización tridimensional del dominio Ω . Las flechas indican las direcciones de los flujos de los líquidos en los pozos de inyección y de extracción. El líquido ingresa a partir del pozo de inyección a la zona de lixiviación, pasando por los pozos de observación, finalmente llegando a los pozos de extracción, donde se recupera el fluido con el mineral extraído mediante lixiviación.

Para estimar la conductividad hidráulica K_σ^ε siguiendo el método propuesto en el Capítulo 2, se deben tener mediciones de los flujos $K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{\partial\Omega}$, lo que se puede hacer con caudalímetros puestos en las zonas de lixiviación de los pozos. Así, se conoce el flujo sobre los mantos de los pozos ∂P , esto es, se conoce

$$\int_{\partial P} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu = \sum_{i=1}^{n_E} \int_{\partial E_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_I} \int_{\partial I_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_O} \int_{\partial O_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu,$$

donde cada integral del lado derecho está medida a partir de cada caudalímetro.

Se puede además suponer un flujo promedio nulo sobre $\partial\Omega \setminus \partial P$, dado que el flujo que pasa por esas zonas no aporta información relevante al problema, ya que no es de interés conocer

las propiedades del suelo en zonas alejadas a los pozos donde no se realizará el proceso de lixiviación. Con esto,

$$\int_{\partial\Omega} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu = \sum_{i=1}^{n_E} \int_{\partial E_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_I} \int_{\partial I_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_O} \int_{\partial O_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu \quad (89)$$

Si bien estas mediciones no permiten conocer puntualmente los flujos, es suficiente conocer sus promedios sobre los mantos de cada pozo, pues el método propuesto en el Capítulo 2 consiste en minimizar un funcional que considera el flujo de manera promedio y no puntual. Por esto, al implementar el Algoritmo 2.15 para estimar K_σ^ε , se propone considerar, para $s \in \partial\Omega$,

$$\begin{aligned} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu(s) &= \sum_{i=1}^{n_E} \frac{\mathbb{1}_{\partial E_i}(s)}{|\partial E_i|} \int_{\partial E_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_I} \frac{\mathbb{1}_{\partial I_i}(s)}{|\partial I_i|} \int_{\partial I_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu \\ &+ \sum_{i=1}^{n_O} \frac{\mathbb{1}_{\partial O_i}(s)}{|\partial O_i|} \int_{\partial O_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu. \end{aligned} \quad (90)$$

Esto es, el flujo puntual se considera constante en cada manto de los pozos, donde dicha constante es la medida por el caudalímetro en cada uno de los mismos. Teniendo ahora los flujos $K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon|_{\partial\Omega}$, se puede aplicar el Algoritmo 2.15 para estimar el tensor de conductividad hidráulica K_σ^ε . Notar que al integrar la expresión (90) sobre $\partial\Omega$, se recupera (89).

Modelo de Darcy transiente

De manera similar al caso estacionario, el modelo de Darcy transiente proviene de homogeneizar un problema de Stokes transiente multiescala (ver, por ejemplo, [8]), de donde se puede plantear el modelo de Darcy como

$$\begin{cases} S_s \partial_t h - \operatorname{div}(K \nabla h) = Q \text{ en } (0, T) \times \Omega \\ h = 0 \text{ sobre } (0, T) \times \partial\Omega \\ h(t = 0) = h_0 \text{ en } \Omega, \end{cases} \quad (91)$$

donde $S_s \in L^\infty(\Omega)$ es el almacenamiento específico y $h_0 \in L^2(\Omega)$ es la condición inicial. Se busca aplicar los resultados del Capítulo 3, por lo que se supone $Q \in \mathcal{C}_0^\infty(\omega \times (0, T))$, para cierto $\omega \subset \Omega$ abierto.

Modelo de Darcy transiente multiescala

Al igual que en el modelo de Darcy estacionario, el modelo de Darcy transiente puede incluir un tensor que presente altas oscilaciones a nivel microscópico, por lo que el modelo de Darcy transiente se puede plantear como el siguiente problema multiescala:

$$\begin{cases} S_s \partial_t h_\sigma^\varepsilon - \operatorname{div}(K_\sigma^\varepsilon \nabla u_\sigma^\varepsilon) = Q \text{ en } (0, T) \times \Omega \\ h_\sigma^\varepsilon = 0 \text{ sobre } (0, T) \times \partial\Omega \\ h_\sigma^\varepsilon(t = 0) = h_0 \text{ en } \Omega. \end{cases} \quad (92)$$

Nuevamente, $\varepsilon > 0$ representa la escala microscópica en la que ocurren las altas oscilaciones del tensor K^ε , sobre el cual se suponen las Hipótesis 1.2, por lo que $K^\varepsilon = K_\sigma^\varepsilon$, para cierto escalar $\sigma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Para estimar el tensor K_σ^ε , se puede proceder como en el Capítulo 3, para lo cual es necesario contar con mediciones de la carga hidráulica $h_\sigma^\varepsilon[Q](\theta, \cdot)$ en Ω para un tiempo $\theta \in (0, T)$ y de los flujos $K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu$ en $(\tau_1, \tau_2) \times \Gamma$, para ciertos tiempos $0 < \tau_1 < \theta < \tau_2 < T$ y un abierto $\Gamma \subset \partial\Omega$. Recordar que para aplicar el Algoritmo 3.29, es necesario contar con términos fuente $\{Q_l\}_{l=1}^{l_0}$ adecuados, donde $l_0 = \frac{d(d+3)}{2} = \frac{3(3+3)}{2} = 9$. Para cada uno de estos términos fuente, se deben medir las cargas en el tiempo θ , $h_\sigma^\varepsilon(\theta, \cdot)[Q_l]$.

Aplicación del modelo de Darcy estacionario multiescala para el problema hidrodinámico en el proyecto de LIS

El dominio se construye de la misma manera que en la sección de la aplicación del modelo de Darcy estacionario, esto es, $\Omega = \Omega_1 \setminus P$, donde $\Omega_1 := [-d/2, d/2]^2 \times [-H, 0]$ y P a la sección de los pozos donde ocurre la lixiviación.

Para la medición de los flujos sobre el borde, se puede usar, al igual que en el caso estacionario, caudalímetros puestos en las zonas de lixiviación de los pozos y se miden en un tiempo $\tau = \tau_2 - \tau_1$. Con esto, se toma $\Gamma = \partial P$ y se obtienen los flujos para cada $t \in (\tau_1, \tau_2)$:

$$\begin{aligned} \int_{\partial P} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu &= \sum_{i=1}^{n_E} \int_{\partial E_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_I} \int_{\partial I_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu \\ &+ \sum_{i=1}^{n_O} \int_{\partial O_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu \end{aligned} \quad (93)$$

Al implementar el Algoritmo 3.29 para estimar K_σ^ε se debe tener la información sobre los flujos de manera puntual, por lo que se propone considerar, para $s \in \partial P$ y $t \in (\tau_1, \tau_2)$,

$$\begin{aligned} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon \cdot \nu(t, s) &= \sum_{i=1}^{n_E} \frac{\mathbb{1}_{\partial E_i}(s)}{|\partial E_i|} \int_{\partial E_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_I} \frac{\mathbb{1}_{\partial I_i}(s)}{|\partial I_i|} \int_{\partial I_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu \\ &+ \sum_{i=1}^{n_O} \frac{\mathbb{1}_{\partial O_i}(s)}{|\partial O_i|} \int_{\partial O_i} K_\sigma^\varepsilon \nabla h_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu. \end{aligned} \quad (94)$$

Notar que al integrar los flujos puntuales sobre ∂P propuestos en (94) se recuperan los flujos medidos en (93).

Para la medición de la carga hidráulica en el tiempo θ en Ω , se puede utilizar un piezómetro en los pozos e interpolar los valores sobre el resto de Ω , obteniendo así, para cada término fuente Q_l , los valores de la carga en el tiempo θ , $h_\sigma^\varepsilon[Q_l](\theta, \cdot)$.

Con esto, se puede proceder como lo indica el Algoritmo 3.29 para estimar el tensor K_σ^ε mediante homogeneización, obteniendo K_m^0 , donde $m \in \mathcal{A}$ resuelve el problema de minimización (3.17).

Problema de transporte

En el contexto del proyecto de lixiviación in situ, el problema de transporte consiste en el estudio del movimiento las partículas del soluto en la solución de lixiviación. Este movimiento está descrito por dos fenómenos: de advección (movimiento de los solutos sobre el fluido siguiendo las líneas de corriente del mismo) y de dispersión (el movimiento de las partículas entre sí).

Modelo de convección-difusión

La concentración de soluto en la solución se puede describir mediante una ecuación de convección-difusión:

$$\begin{cases} \partial_t c - \operatorname{div}(D\nabla c) - \vec{V} \cdot \nabla c = R \text{ en } (0, T) \times \Omega \\ c = 0 \text{ sobre } \partial\Omega \\ c(t = 0) = c_0 \text{ en } \Omega, \end{cases} \quad (95)$$

donde la función escalar incógnita c representa la concentración del soluto, D es el tensor de difusión, $\vec{V} = K\nabla h$ es la velocidad del fluido, donde K es el tensor de conductividad hidráulica del medio y h la carga hidráulica, ambos conocidos al resolver los problemas inverso y directo respectivamente asociados al problema hidrodinámico¹⁴. R es el término fuente que corresponde a la producción de soluto a causa de las reacciones químicas, o bien a aportes externos, como los dados por los pozos. Además, c_0 es la concentración inicial del soluto.

Modelo de convección-difusión multiescala

En ciertos casos, el tensor de difusión D puede ser altamente oscilante en escalas microscópicas, por lo que se denota D^ε , donde $\varepsilon > 0$ es la escala microscópica y el fenómeno de transporte se puede modelar como el siguiente problema multiescala:

$$\begin{cases} \partial_t c^\varepsilon - \operatorname{div}(D^\varepsilon \nabla c^\varepsilon) - \vec{V} \cdot \nabla c^\varepsilon = R \text{ en } (0, T) \times \Omega \\ c^\varepsilon = 0 \text{ sobre } \partial\Omega \\ c^\varepsilon(t = 0) = c_0 \text{ en } \Omega. \end{cases} \quad (96)$$

Para más detalles, ver [36]. El tensor de difusión en un medio anisotrópico es simétrico y se supondrá definido positivo. Más aún, se considerarán las Hipótesis 1.2 sobre D^ε . En particular, existe una función escalar $\sigma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ que define al tensor, esto es, $D^\varepsilon = D_\sigma^\varepsilon$. Para resolver este problema utilizando el método propuesto en el Capítulo 3, es necesario contar con mediciones de la concentración en un tiempo $\theta \in (0, T)$, $c_\sigma^\varepsilon[R](\theta, \cdot)$ en Ω , y de los flujos difusivos $D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon \cdot \nu|_{(\tau_1, \tau_2) \times \Gamma_0}$, donde $0 < \tau_1 < \theta < \tau_2 < T$ y $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ es un abierto no vacío.

¹⁴Más precisamente, se encuentra el tensor homogeneizado $K = K^0$ y la carga hidráulica homogeneizada $h = h^0$.

Aplicación del modelo de convección-difusión multiescala para el problema de transporte en el proyecto de LIS

Para obtener $c_\sigma^\varepsilon[R](\theta, \cdot)$ en Ω , se propone proceder como sigue: Tomar muestras de solución de los pozos. Con un colorímetro, medir las concentraciones de la solución obtenidas a partir de estos pozos. Estas mediciones sólo se toman en partes de Ω , por lo que se debe buscar una manera de estimar los valores en el resto de Ω . Una posibilidad es mediante interpolación (por ejemplo, lineal) entre pozos contiguos siguiendo la dirección del fluido. En el Ejemplo .43, el fluido sigue la dirección partiendo del pozo de inyección en azul, y expandiéndose simétricamente alcanzando los otros pozos, por lo que la interpolación se haría entre las mediciones de concentración entre pozos de extracción y observación contiguos.

Para obtener los flujos difusivos $D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon \cdot \nu$ sobre $(\tau_1, \tau_2) \times \partial P$, se puede utilizar la técnica de gradientes de difusión en capas delgadas (comúnmente utilizando las siglas en inglés DGT¹⁵), los que se basan en la ley de Fick, esto es, el flujo difusivo \vec{J} satisface $\vec{J} = D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon \cdot \nu$. Para más detalles sobre este método, ver [42], [43]. Con esto, se obtienen los flujos sobre el borde de los pozos ∂P , esto es, para cada $t \in (0, T)$, se obtienen

$$\int_{\partial P} D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu = \sum_{i=1}^{n_E} \int_{\partial E_i} D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_I} \int_{\partial I_i} D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_O} \int_{\partial O_i} D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu. \quad (97)$$

Nuevamente, para aplicar el Algoritmo 3.29, se requiere el conocimiento puntual de los flujos, por los que, de manera similar a cómo se hizo en el problema hidrodinámico, se propone determinar los flujos como valores constantes en cada superficie de las porciones de los pozos en la zona de lixiviación, esto es, para cada $s \in \partial P$ y $t \in (\tau_1, \tau_2)$, se define el flujo de concentraciones como

$$\begin{aligned} D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon \cdot \nu(t, s) &= \sum_{i=1}^{n_E} \frac{\mathbb{1}_{\partial E_i}(s)}{|\partial E_i|} \int_{\partial E_i} D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu + \sum_{i=1}^{n_I} \frac{\mathbb{1}_{\partial I_i}(s)}{|\partial I_i|} \int_{\partial I_i} D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu \\ &+ \sum_{i=1}^{n_O} \frac{\mathbb{1}_{\partial O_i}(s)}{|\partial O_i|} \int_{\partial O_i} D_\sigma^\varepsilon \nabla c_\sigma^\varepsilon(t) \cdot \nu. \end{aligned} \quad (98)$$

Al igual que en los casos anteriores, cabe notar que al integrar (98) sobre ∂P se recuperan las mediciones directas (97).

Con esto, se puede proceder como lo indica el Algoritmo 3.29 para estimar el tensor D_σ^ε mediante homogeneización, obteniendo D_m^0 , donde $m \in \mathcal{A}$ resuelve el problema de minimización (3.17).

¹⁵*Diffusive Gradients in Thin films.*