



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

**MÉTODOS NUMÉRICOS A VARIACIÓN ACOTADA
PARA UN SISTEMA DE ECUACIONES DE TIPO
LIFSHITZ-SLYOZOV CON APLICACIONES A
MODELOS DE POLÍMEROS**

POR
JORGE LUIS ESPINOZA ORTEGA

Tesis presentada a la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
de la Universidad de Concepción para optar al título profesional de
Ingeniero Civil Matemático

Profesores guía: Mauricio Sepúlveda, Erwan Hingant

Abril de 2018
Concepción, Chile

© 2018 Jorge Luis Espinoza Ortega

Se autoriza la reproducción total o parcial, con
fines académicos, por cualquier medio o procedimiento,
incluyendo la cita bibliográfica del documento.

MÉTODOS NUMÉRICOS A VARIACIÓN ACOTADA PARA UN SISTEMA DE ECUACIONES DE TIPO LIFSHITZ-SLYOZOV CON APLICACIONES A MODELOS DE POLÍMEROS

**POR
JORGE LUIS ESPINOZA ORTEGA**

Comisión evaluadora

Dr. Mauricio Sepúlveda Cortés
Departamento de Ingeniería Matemática
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de Concepción

Dr. Erwan Hingant
Departamento de Matemática
Facultad de Ciencias
Universidad del Bío-Bío

Dr. Aníbal Coronel Pérez
Departamento de Ciencias Básicas
Facultad de Ciencias
Universidad del Bío-Bío

Dr. Julio Sánchez Poblete
Departamento de Ciencias del Ambiente
Facultad de Química y Biología
Universidad de Santiago

**Abril de 2018
Concepción, Chile**

Agradecimientos

Agradezco a mis directores de memoria, Mauricio Sepúlveda, por su infinita paciencia, disposición y buen trato, tanto en reuniones de avance como en conversaciones en general, y Erwan Hingant, quien con su perspicacia y profundo dominio del tema me ayudó a tener claridad sobre el desarrollo de esta memoria. Ambos fueron exigentes y agradables, incluso cuando me faltó dedicación, agilidad o mejor comunicación.

A los proyectos Fondecyt 1140676 y 1110540, y Anillo ACT1118 (ANANUM) por financiar este trabajo.

A Felipe, Francisca, Iván, Matías, Javiera, Gabriela y el otro Felipe, quienes me acompañaron en algún momento mientras trabajaba en esta memoria, dedicando su tiempo a conversar, aconsejar, reprochar, tocar música o pasarlo bien. Fueron un gran apoyo, cada uno a su manera, siendo la confianza el principal aspecto en común.

Por último, agradezco a mi familia, en especial a mis padres, Eugenia y Luis, por la formación que me han dado y, por si fuera poco, haberme brindado su ayuda en esta etapa sin dudar un solo segundo.

Índice

Agradecimientos	IV
Resumen	XII
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Fenómeno de sorción	3
2. Planteamiento del problema	5
2.1. Modelo de Lifshitz-Slyozov	5
2.2. Modelo de interés	6
2.3. Problema reescalado	8
2.4. Formulación débil	9
3. Descripción del esquema numérico	10
3.1. Discretización del dominio	10
3.2. Sistema de ecuaciones discreto	11
3.3. Declaración de la convergencia	14
4. Propiedades del esquema numérico	16
4.1. Estabilidad	16
4.2. Variación total acotada	23

4.2.1. Cota para la variación total en r	24
4.2.2. Cota para la variación total en p	30
4.2.3. Cota para la variación total global	36
5. Convergencia del método	39
5.1. Resultados de compacidad	39
5.2. Demostración de la convergencia	43
6. Resultados	51
6.1. Ejemplo 1	53
6.2. Ejemplo 2	66
6.3. Ejemplo 3	79
6.4. Ejemplo 4	92
Conclusiones	106
Bibliografía	108

Índice de Tablas

6.1. Ejemplo 4: Distribución (aproximada) de la masa $\int_{\mathcal{S}_P} rpf_h(t, p, r)drdp$, a través del tiempo, en las zonas de $\mathcal{S}_P$ donde se acumula f_h	93
--	----

Índice de figuras

6.1. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 0; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	54
6.2. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 0,125; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	55
6.3. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 0,25; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	56
6.4. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 0,5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	57
6.5. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 0,75; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	58
6.6. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	59
6.7. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	60
6.8. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 3; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	61
6.9. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	62
6.10. Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 8; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	63
6.11. Ejemplo 1: Gráfico de u_h con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	64
6.12. Ejemplo 1: Gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ con $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$, junto a la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$	65

6.13. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 0; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	67
6.14. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 0,125; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	68
6.15. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 0,25; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	69
6.16. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 0,5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	70
6.17. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 0,75; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	71
6.18. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	72
6.19. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	73
6.20. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 3; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	74
6.21. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	75
6.22. Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 8; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	76
6.23. Ejemplo 2: Gráfico de u_h con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$	77
6.24. Ejemplo 2: Gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ con $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$, junto a la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$	78
6.25. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 0; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$	80
6.26. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 0,25; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$	81
6.27. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 0,5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$	82
6.28. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$	83

- 6.29. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$. 84
- 6.30. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 3; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$. 85
- 6.31. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 4; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$. 86
- 6.32. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$. 87
- 6.33. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 10; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$. 88
- 6.34. Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 20; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$. 89
- 6.35. Ejemplo 3: Gráfico de u_h con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$ 90
- 6.36. Ejemplo 3: Gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ con $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$, junto a la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$ 91
- 6.37. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 94
- 6.38. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,05; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 95
- 6.39. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 96
- 6.40. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,15; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 97
- 6.41. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 98
- 6.42. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,3; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 99
- 6.43. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 100
- 6.44. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 101

- 6.45. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 102
- 6.46. Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 4; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$. 103
- 6.47. Ejemplo 4: Gráfico de u_h con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$ 104
- 6.48. Ejemplo 4: Gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ con $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$, junto a la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$ 105

Resumen

El presente trabajo está dedicado al estudio de un esquema numérico que resuelve un sistema de ecuaciones de tipo Lifshitz-Slyozov. Dicho esquema entrega soluciones aproximadas que, eventualmente, convergen a la solución exacta del sistema de ecuaciones a medida que la malla de discretización del dominio se hace más fina. Esto último se demuestra utilizando el concepto de variación acotada que permite establecer argumentos de compacidad.

Las ecuaciones de Lifshitz-Slyozov originales se propusieron para modelar la precipitación de soluciones sólidas sobresaturadas. Sin embargo, aquí se utiliza una variación de éstas para describir el fenómeno de sorción, entendida como una reacción química reversible en la cual iones de metal se adhieren a la superficie de un polímero o se desprenden de ésta.

El capítulo 1 muestra una introducción que permite conocer el contexto de las ecuaciones. Para ello, se inicia con una motivación que explica los procesos de separación de sustancias y su importancia, siendo la sorción un ejemplo de éstos. Además, se explica en qué consiste la sorción y cuáles son sus cantidades involucradas.

Ya introducido el tema, en el capítulo 2 se plantean las ecuaciones de interés, las cuales se obtienen a partir de las ecuaciones de Lifshitz-Slyozov. Por comodidad de notación y de resolución computacional, se hace necesario reescalar el problema para que las variables y el dominio utilizado tengan una forma que facilite tanto el desarrollo del esquema numérico como el planteamiento de las ecuaciones. Se presenta, además, la formulación débil que es el verdadero problema que pretende resolver el método numérico propuesto posteriormente.

El capítulo 3 describe el esquema numérico en forma detallada, definiendo el dominio discreto sobre el cual se trabaja y un sistema de ecuaciones discreto que encuentra la solución aproximada del problema débil. Este sistema de ecuaciones incluye un esquema de volúmenes finitos. Se expone de manera formal el teorema que garantiza la convergencia del esquema, es decir, aquel que garantiza que la solución numérica tiende a la solución exacta del problema débil cuando la malla que discretiza al dominio tiende a hacerse más fina.

Una vez presentado el teorema de convergencia del esquema, el capítulo 4 presenta diversos resultados que son necesarios para demostrar dicho teorema. Se demuestra entonces la estabilidad L^∞ del método y una estimación de la variación total, junto a propiedades que contribuyen tanto a las demostraciones de este mismo capítulo como a algunos pasos del

desarrollo del capítulo siguiente.

La demostración del teorema de convergencia se concreta en el capítulo 5, en el cual primero se establecen resultados de compacidad con ayuda del Teorema de Arzelà-Ascoli y utilizando el hecho de que las soluciones aproximadas poseen variación total acotada. Se prueba, entonces, que la solución del método numérico converge a un elemento, para luego demostrar que dicho elemento es solución del problema débil. Esto último corresponde a la demostración del teorema planteado al final del capítulo 3, lo cual valida el método propuesto.

Por último, el capítulo 6 muestra los resultados obtenidos al resolver el esquema numérico a través de cuatro ejemplos distintos que incluyen diversas graficas que dejan en evidencia el comportamiento asintótico de las soluciones a lo largo del tiempo.

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Se conoce como proceso de *separación* a aquel que permite eliminar ciertos compuestos de interés a partir de una muestra que contiene otras sustancias que pueden reaccionar de manera similar. Se aplican, por ejemplo, a la preparación de compuestos puros a partir de una mezcla (Meloan, 1999).

Un ejemplo de proceso de separación es la *adsorción*,¹ que se define como la formación de una capa de gas, líquido o sólido en la superficie de otro material sólido o, menos frecuentemente, líquido. Cuando dicha capa se forma mediante enlaces químicos se denomina *quimisorción*, a diferencia de la *fisisorción* que ocurre debido a fuerzas de Vander Waals más débiles. Así, dicha superficie involucrada en la adsorción se llama *adsorbente*. Al proceso inverso, donde la sustancia adsorbida es liberada, se le denomina *desorción* (Oxford, 2008).

Un adsorbente común es el carbón activado, el cual consiste en carbón con poros de tamaño molecular que permiten la adsorción. Se obtiene a partir del carbón natural u otras sustancias como las maderas duras, cáscaras de coco y otros sistemas macromoleculares. El carbón activado se utiliza para la purificación del agua y del aire, además de la separación de algunas mezclas de gases (Marsh y Rodríguez-Reinoso, 2006).

Dentro de los métodos de separación, es conocida la adsorción por cambio de presión, cuyo nombre se suele reemplazar por sus siglas en inglés PSA (*Pressure Swing Adsorption*). Este proceso consiste en utilizar un adsorbente para retirar un material específico de una mezcla y, posteriormente, regenerar dicho adsorbente mediante cambios de presión a temperaturas determinadas que provocan la desorción.

¹No se debe confundir la adsorción con la *absorción*. En este último, la sustancia absorbida penetra la otra sustancia. (Oxford, 2008)

Entre las aplicaciones más importantes del proceso PSA se encuentran la separación del aire, el secado del aire y la purificación del nitrógeno (N_2) e hidrógeno (H_2). Para este último, normalmente se alcanza una pureza de un 99.995 % o más, a diferencia del nitrógeno que suele alcanzar niveles de pureza cercanos a un 99.5 %.

El hidrógeno ultrapuro se suele recuperar a partir del gas combustible, utilizando adsorbentes como el carbón activado o las *zeolitas*.² Esta última es ampliamente utilizada en diversas aplicaciones del proceso PSA. Para el secado del aire, se utiliza alúmina (Al_2O_3) que adsorbe la humedad.

Si bien muchos niveles de pureza pueden ser evaluados como altamente efectivos, estos procesos generalmente tienen limitaciones económicas que sólo permiten aplicarlos a pequeña escala. Sin embargo, procesos como la separación del hidrocarburo en refinerías de petróleo pueden llegar a una producción superior a 100 toneladas diarias (Ruthven et al., 1994).

Otro ejemplo de separación en grandes volúmenes es aquel en que se aprovecha el fenómeno de adsorción para purificar agua contaminada con arsénico. Para este caso, se introducen al agua contaminada flóculos de materiales con una fuerte afinidad al arsénico disuelto, tales como el hierro y el hidróxido de aluminio. De esta forma, la superficie de estos sólidos atrae al arsénico, facilitando su retiro en una etapa posterior (Johnston y Heijnen, 2001).

Se pueden mencionar muchos casos alrededor del mundo en los cuales el arsénico contenido en el agua potable ha superado los estándares sugeridos por la OMS (*Organización Mundial de la Salud*). Dicha organización recomienda una concentración máxima de $10 \mu g/L$ (World Health Organization, 2001). Sin embargo, la OMS identifica al proceso de coagulación como el mejor método para eliminar arsénico en grandes volúmenes (World Health Organization, 2002), tal como se ha aplicado en la zona norte de Chile desde finales de la década de 1970 (Sancha, 2006) y en casos más extremos como el de Bangladés, donde unas 5 millones de personas estaban expuestas a concentraciones mayores a $200 \mu g/L$ de arsénico en el agua potable, además de otras 19 millones expuestas a concentraciones mayores a $50 \mu g/L$ (Flanagan et al., 2012).

En general, los métodos de adsorción son importantes para controlar los niveles de concentración en que se encuentran los metales pesados en sus diversas fuentes. Muchos de éstos son esenciales para la vida y el ecosistema, siempre y cuando se encuentren en cantidades correctas. Por ejemplo, una baja exposición a algunos metales de manera crónica puede afectar severamente la salud y el medio ambiente, pero el exceso de estos materiales puede ser venenoso (Wang et al., 2009).

Una técnica particular de separación para purificar agua utilizando la adsorción consiste en introducir un polímero específico en la solución acuosa, de manera que el estado final esté compuesto solamente por el mismo polímero pero más pesado -debido a la adhesión de

²Una zeolita es un aluminosilicato hidratado, natural o sintético, con una estructura tridimensional de cristal abierta, cuyas cavidades mantienen a las moléculas de agua (Oxford, 2008).

iones- y el agua pura. Posteriormente, el agua se filtra a través de una membrana porosa que impide el paso del polímero. Los detalles del fenómeno se explican en (Rivas et al., 2003) y (Rivas et al., 2011).

La interacción entre un polímero y un ion en la adsorción se describe en la sección siguiente, siendo el fenómeno que motiva el desarrollo de este trabajo.

1.2. Fenómeno de sorción

Un *polímero* es una macromolécula que está formada por unidades más pequeñas, llamadas *monómeros*, que se encuentran unidas de extremo a extremo. Éstos se pueden encontrar en materiales usados en la vida cotidiana tales como plástico, caucho y fibras, que son aprovechados como aislantes eléctricos o en llantas de neumáticos y envasado de alimentos, por mencionar algunos ejemplos. No existen sustitutos para dichos materiales que cumplan aquellas funciones (McCrum et al., 1997).

Dentro del área de la Química que estudia a los polímeros, es de especial interés analizar las interacciones que se generan entre dichas macromoléculas y los iones de metal. Los polímeros que permiten la adhesión de iones de metal son utilizados principalmente en las técnicas de purificación del agua, fundamental en diversos procesos que van desde el tratamiento de aguas contaminadas hasta la producción de agua ultrapura para fines comerciales. Aunque este fenómeno se asocia generalmente a la purificación de agua, es posible utilizarlo en cualquier proceso de separación donde se desee extraer una sustancia altamente diluida en otro líquido (Zagrodni, 2007).

El fenómeno de adhesión y separación de un ion a una molécula de un polímero se denomina *sorción*, el cual se entiende en este documento como una reacción química reversible, tal como lo menciona (Rivas et al., 2006). Por lo tanto, la *adsorción* mencionada en la sección anterior consiste en la adhesión del ion al polímero y la *desorción* corresponde a la reacción inversa, es decir, la separación del ion. Por otra parte, el polímero en cuestión debe poseer moléculas que estén disponibles para recibir a los iones de la solución. A los conjuntos de estas últimas se les denomina *grupos funcionales*.

Cabe notar que este trabajo se enfoca en la interacción polímero-metal. En (Hingant y Sepúlveda, 2015) se muestra un análisis que incluye la interacción polímero-polímero.

Siguiendo la notación de (Hingant y Sepúlveda, 2015), dado un polímero, sea $x \in \mathbb{N}$ el número de grupos funcionales e $y \in \{0, \dots, x\}$ el número de iones situados en el polímero. Se dice entonces que el par (x, y) es la *configuración* del polímero, por lo cual este último se representa por $P_{x,y}$. Si M es un ion de metal libre, la reacción química reversible entre el ion

de metal y el polímero se puede escribir en la forma



donde $k_{x,y}$ es la *tasa de adsorción* con la cual un polímero de configuración (x, y) capta un ion de metal para obtener la nueva configuración $(x, y+1)$, y $l_{x,y+1}$ es la *tasa de desorción* con la cual un polímero de configuración $(x, y+1)$ libera un ion de metal para obtener la nueva configuración (x, y) . Notar que las tasas de adsorción y desorción dependen de la cantidad de grupos funcionales y de iones adheridos a éstos que tenga el polímero.

Las ecuaciones que modelan el fenómeno de sorción se plantean en el capítulo siguiente.

Capítulo 2

Planteamiento del problema

El capítulo anterior introduce el fenómeno de sorción junto a los términos adsorción, desorción, grupos funcionales y configuración del polímero. El presente capítulo, en cambio, propone el modelo de interés que se obtiene a partir de las ecuaciones de Lifshitz-Slyozov. Se plantea el problema débil que es el verdadero sistema de ecuaciones que pretende resolver el esquema numérico expuesto posteriormente.

2.1. Modelo de Lifshitz-Slyozov

Si se compara la precipitación de soluciones supersaturadas con la sorción, ambos poseen cierta similitud. En el primero, se forman partículas sólidas dentro de un líquido, o descrito de otra forma, existen monómeros que se acoplan continuamente a conjuntos más grandes de éstos, denominados *clústers*, como se menciona en (Collet y Goudon, 2000). Este acople de monómeros a los clústers se asemeja a la adhesión de iones a los polímeros en la sorción, motivo por el cual en (Hingant y Sepúlveda, 2015) se modela la sorción tal como se hace con la precipitación mencionada.

La precipitación de soluciones supersaturadas se modela en (Becker y Döring, 1935), donde se proponen las ecuaciones de Becker-Döring. Este modelo involucra variables discretas, pues éstas corresponden a cantidades de partículas. Si bien el modelo discreto debería ser considerado como la forma correcta de describir este fenómeno, usualmente es más práctico trabajar con variables continuas, tomando en cuenta que la existencia o ausencia de una partícula significa una diferencia “muy pequeña”.

En (Lifshitz y Slyozov, 1961) se estudia la precipitación de soluciones supersaturadas con variables continuas, donde se presentan las ecuaciones de Lifshitz-Slyozov, difiriendo de la naturaleza discreta presente en las ecuaciones de Becker-Döring, a pesar de tratarse del mismo fenómeno. Dicha propuesta está lejos de ser una simple transformación al azar, pues

la conexión entre el sistema discreto y el continuo está desarrollada de manera formal en documentos tales como (Collet et al., 2002) y (Yvinec et al., 2015).

Las ecuaciones de Lifshitz-Slyozov originales están escritas en la forma

$$\partial_t f(t, x) + \partial_x [(k(x)c(t) - q(x))f(t, x)] = 0, \quad t \in (0, T), \quad x > 0, \quad (2.1a)$$

$$c(t) + \int_0^\infty x f(t, x) dx = \rho, \quad t \in (0, T), \quad (2.1b)$$

según se menciona en (Collet y Goudon, 2000).

En este caso, las variables independientes t y x corresponden al tiempo y al volumen de los clústers, respectivamente. Así, la función de densidad de tamaño $f(t, x)$ describe, para un determinado tiempo t , la distribución de clústers respecto de sus volúmenes x .

La ecuación (2.1a) es una ecuación de transporte para la función de densidad $f(t, x)$. Los coeficientes cinéticos $k(x)$ y $q(x)$ representan las tasas con las cuales los monómeros son añadidos y extraídos, respectivamente, en un clúster de tamaño x . El término $c(t)$ representa la cantidad de monómeros dispersos en la solución, en el tiempo t .

Por otro lado, (2.1b) es una ecuación integral que corresponde a la conservación de la masa total. De esta forma, el término

$$\int_0^\infty x f(t, x) dx$$

es la cantidad de monómeros que se encuentran en forma de clústers en el tiempo t . Por lo tanto, ρ es la cantidad total de monómeros. Dichas cantidades pueden ser expresadas, por ejemplo, como masa o concentración molar.

A partir de la sección 2.2 se exponen las ecuaciones para el caso de interés, es decir, el fenómeno de sorción con sus respectivas cantidades relacionadas con los polímeros y los iones de metal.

2.2. Modelo de interés

El modelo a estudiar se basa en la reacción (1.1), suponiendo que existe un gran número de partículas correspondientes a iones y polímeros dentro de una solución. De aquí en adelante, se usa el término “polímeros” para referirse a partículas de dicha sustancia.

Las ecuaciones involucran tres variables independientes t, p, q , de las cuales la primera corresponde al tiempo y las otras dos están relacionadas con la configuración de los polímeros. La variable $p \in \mathbb{R}^+$ es la cantidad de grupos funcionales que posee un polímero y $q \in \mathbb{R}^+$ es la cantidad de grupos funcionales que dicho polímero tiene ocupados, es decir, aquellos

que están asociados a algún ion. Evidentemente, la cantidad de grupos funcionales ocupados debe ser menor que la cantidad total de éstos, por lo cual el conjunto de configuraciones admisibles para los polímeros está dado por

$$\mathcal{S} := \{(p, q) \in \mathbb{R}_+^2 : 0 < q < p\}.$$

De esta forma, pueden existir muchos polímeros cuya cantidad total de grupos funcionales y cantidad de grupos funcionales ocupados son p y q , respectivamente, lo cuales están representados por un sólo elemento de $\mathcal{S}$.

Lo anterior sugiere una función de distribución que describa las cantidades de polímeros presentes para cada configuración. Se sabe que, para la sorción, las configuraciones de polímeros varían en el tiempo. Por lo tanto, se define la función de densidad $f : \mathbb{R}^+ \times \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}^+$ que indica que, para cada $t \in \mathbb{R}^+$, la distribución de polímeros es $f(t, \cdot, \cdot)$. Dicho de otra forma, la cantidad $f(t, p, r)$ representa la densidad de polímeros con configuración (p, r) en el tiempo t .

A partir de estas definiciones, se plantean las ecuaciones basadas en las originales de Lifshitz-Slyozov. La primera ecuación involucrada está dada por

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q}(\mathcal{V}f) = 0, \quad \text{en } \mathbb{R}^+ \times \mathcal{S}, \quad (2.2)$$

donde $\mathcal{V}$ es la *tasa de sorción* definida en la forma

$$\mathcal{V}(u(t), p, q) = k(p, q)u(t) - l(p, q),$$

la cual incluye a la tasa de adsorción k , la tasa de desorción l y la concentración de iones de metal libres $u(t)$. Tanto k como l son no negativos. La segunda ecuación está dada por

$$u(t) + \int_{\mathcal{S}} qf(t, p, q)dqdp = \rho, \quad \text{en } \mathbb{R}^+, \quad (2.3)$$

donde ρ es la cantidad total de iones de metal en el sistema. Observar que el término

$$\int_{\mathcal{S}} qf(t, p, q)dqdp$$

corresponde a la cantidad total de iones que están acoplados a polímeros.

El problema consiste, entonces, en encontrar f y u que satisfagan (2.2) y (2.3), además de la condición de borde

$$f = 0, \quad \text{en } \partial\mathcal{S} := \{(p, q) \in \mathbb{R}^+ : q = 0 \vee p = q\}, \quad (2.4)$$

y las condiciones iniciales

$$\begin{aligned} f(t = 0, \cdot, \cdot) &= f^{in}, \quad \text{en } \mathcal{S}, \\ u(t = 0) &= u^{in}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde f^{in} es una función no negativa en $\mathcal{S}$ y u^{in} un número real no negativo.

Las ecuaciones recién definidas presentan el inconveniente de que el conjunto $\mathcal{S}$ posee una forma “triangular” y no acotada, lo cual incomoda al momento de resolver de manera computacional. Para facilitar aquello, se debe reescalar el problema.

2.3. Problema reescalado

A continuación, se redefine el conjunto $\mathcal{S}$ de manera que su forma sea “rectangular” y acotada. Como consecuencia, las ecuaciones también sufren el reescalamiento pues se debe obtener un problema equivalente a lo planteado en la sección 2.2. Para cumplir este objetivo, se define la variable

$$r := \frac{q}{p},$$

la cual representa, para un polímero, la proporción de grupos funcionales ocupados respecto de su cantidad total, cuyo valor está entre 0 y 1. Con esto, se abandona el trío de variables independientes t, p, q para comenzar a utilizar t, p, r . Se trabaja, entonces, con el nuevo espacio configuracional

$$\mathcal{S} = \mathbb{R}^+ \times (0, 1).$$

Con la nueva notación, se dice que un polímero posee configuración (p, r) cuando la cantidad de grupos funcionales es p y la proporción de grupos funcionales ocupados por iones respecto de la cantidad total es r .

Por otro lado, se define

$$\hat{f}(t, p, r) := pf(t, p, rp), \quad (2.6a)$$

$$\hat{\mathcal{V}}(u(t), p, r) := \frac{1}{p}\mathcal{V}(u(t), p, rp). \quad (2.6b)$$

Con estas nuevas definiciones, la ecuación (2.2) se escribe en la forma

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(\hat{\mathcal{V}}\hat{f}) = 0.$$

Por comodidad se escriben $\hat{f}$ y $\hat{\mathcal{V}}$ como f y $\mathcal{V}$, entendiéndose que se trabaja desde ahora en adelante con estas nuevas definiciones dadas por el problema reescalado.

Para poder utilizar un dominio finito que se pueda implementar computacionalmente, se fijan $T, P > 0$, considerando ahora el dominio

$$[0, T] \times \mathcal{S}_P \subset \mathbb{R}_+ \times \mathcal{S},$$

donde $\mathcal{S}_P := (0, P) \times (0, 1)$.

El problema, con las nuevas variables, queda escrito en la forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(\mathcal{V}f) = 0, \quad \text{en } [0, T] \times \mathcal{S}_P, \quad (2.7a)$$

$$u(t) + \int_{\mathcal{S}_P} rpf(t, p, r)drdp = \rho, \quad \text{en } [0, T], \quad (2.7b)$$

$$f = 0, \quad \text{en } [0, T] \times \partial\mathcal{S}_P, \quad (2.7c)$$

$$f(t = 0, \cdot, \cdot) = f^{in}, \quad \text{en } \mathcal{S}_P, \quad (2.7d)$$

$$u(t = 0) = u^{in}, \quad (2.7e)$$

donde $f^{in} \in L^1(\mathcal{S}_P)$ y u^{in} son no negativos.

2.4. Formulaci3n d3bil

Una vez propuesto el sistema de ecuaciones (2.7), se tiene el siguiente problema d3bil asociado:

Encontrar (f, u) , con $f \in \mathcal{C}([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P))$ y $u \in \mathcal{C}([0, T])$, tales que

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f(t, p, r) \varphi_t(t, p, r) drdpdt + \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) drdp \\ & + \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} \mathcal{V}(t, p, r) f(t, p, r) \partial_r \varphi(t, p, r) drdpdt = 0, \end{aligned} \quad (2.8a)$$

$$u(t) + \int_{\mathcal{S}_P} rpf(t, p, r)drdp = \rho, \quad \text{en } [0, T], \quad (2.8b)$$

para todo $\varphi \in C_c^1([0, T] \times \mathcal{S}_P)$.

En el cap3tulo 3 se discretiza el problema (2.8) para presentar un esquema de vol3menes finitos, proponiendo as3 una soluci3n num3rica, es decir, aproximaciones de las funciones f y u que converjan a la soluci3n exacta de (2.8).

Capítulo 3

Descripción del esquema numérico

En el presente capítulo se expone el problema discretizado que permite encontrar una solución aproximada (f_h, u_h) del problema débil (2.8).

En primer lugar, se define una malla que discretiza al dominio $[0, T) \times \mathcal{S}_P$, particionando $[0, T)$, $[0, P]$ y $[0, 1]$ en intervalos regulares. Luego, se plantea el sistema de ecuaciones discreto para encontrar f_h y u_h , incluyendo un esquema de volúmenes finitos obtenido a partir de la ecuación (2.7a). Por último, se establece un teorema, con sus respectivas hipótesis, que garantiza que la solución del esquema numérico converge a la solución del problema débil a medida que la malla se hace más fina.

El teorema mencionado sólo se declara en este capítulo y su demostración se posterga para el capítulo 5 debido a que requiere las propiedades establecidas en el capítulo 4.

3.1. Discretización del dominio

Una vez fijos $P > 0$ y $T > 0$, se debe discretizar el dominio $[0, T) \times \mathcal{S}_P$, definiendo primero la cantidad de celdas respecto de cada variable involucrada. Para ello, se fijan $N, J, I \in \mathbb{N}$, los cuales determinan la cantidad de divisiones que poseen los intervalos $[0, T)$, $[0, P]$ y $[0, 1]$, respectivamente. Se procede, entonces, a definir los nodos de cada uno de los intervalos mencionados.

Para discretizar $[0, T)$, se definen

$$t_n, \quad n \in \{0, \dots, N\},$$

donde

$$t_n = n\Delta t, \quad \Delta t = T/N.$$

Con esto, se tiene una partición de $[0, T)$ dada por

$$\{[t_n, t_{n+1})\}_{n \in \{0, \dots, N-1\}}.$$

Para el espacio $\mathcal{S}_P$ se utiliza la malla definida por

$$(\Lambda_{j,i})_{(j,i) \in \{0, \dots, J\} \times \{0, \dots, I\}},$$

donde cada celda $\Lambda_{j,i}$ está definida por

$$\Lambda_{j,i} = (p_{j-1/2}, p_{j+1/2}) \times (r_{i-1/2}, r_{i+1/2}), \quad j \in \{0, \dots, J\}, \quad i \in \{0, \dots, I\}.$$

Los valores

$$\begin{aligned} p_{j-1/2}, \quad j &\in \{0, \dots, J+1\}, \\ r_{i-1/2}, \quad i &\in \{0, \dots, I+1\}, \end{aligned}$$

corresponden a las posiciones extremas de cada elemento $\Lambda_{j,i}$ en las variables p y r , respectivamente, donde

$$p_{j-1/2} = j\Delta p, \quad r_{i-1/2} = i\Delta r,$$

con

$$\Delta p = \frac{P}{J+1} < 1, \quad \Delta r = \frac{1}{I+1}.$$

De esta manera, los centros de cada $\Lambda_{j,i}$ están dados por (p_j, r_i) , para cada $(j, i) \in \{0, \dots, J\} \times \{0, \dots, I\}$.

3.2. Sistema de ecuaciones discreto

Una vez discretizado el espacio, se utiliza un esquema de volúmenes finitos, el cual consiste en encontrar una sucesión de valores $f_{j,i}^n$, para $(j, i) \in \{0, \dots, J\} \times \{0, \dots, I\}$ y $n \in \{0, \dots, N-1\}$, que aproximen los valores medios de f en cada volumen $\Lambda_{j,i}$, para cada tiempo t_n , es decir,

$$f_{j,i}^n \approx \frac{1}{|\Lambda_{j,i}|} \int_{\Lambda_{j,i}} f(t_n, p, r) dr dp. \quad (3.1)$$

Así, la solución numérica que aproxima a la solución exacta f está dada por

$$f_h := \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I f_{j,i}^n \mathbf{1}_{[t_n, t_{n+1}) \times \Lambda_{j,i}},$$

donde $h = (\Delta t, \Delta p, \Delta r)$. Se define $|h| := \max(\Delta t, \Delta p, \Delta r)$.

Para obtener el esquema, se integra la ecuación (2.7a) sobre $[t_n, t_{n+1}) \times \Lambda_{j,i}$, de donde

$$\begin{aligned} & \int_{\Lambda_{j,i}} f(t_{n+1}, p, r) dr dp - \int_{\Lambda_{j,i}} f(t_n, p, r) dr dp \\ & + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{p_{j-1/2}}^{p_{j+1/2}} (\mathcal{V}f)(t, p, r_{i+1/2}) dp dt \\ & - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{p_{j-1/2}}^{p_{j+1/2}} (\mathcal{V}f)(t, p, r_{i-1/2}) dp dt = 0. \end{aligned}$$

Dividiendo esta última ecuación por $|\Lambda_{j,i}|$,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{|\Lambda_{j,i}|} \int_{\Lambda_{j,i}} f(t_{n+1}, p, r) dr dp - \frac{1}{|\Lambda_{j,i}|} \int_{\Lambda_{j,i}} f(t_n, p, r) dr dp \\ & + \frac{1}{|\Lambda_{j,i}|} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{p_{j-1/2}}^{p_{j+1/2}} (\mathcal{V}f)(t, p, r_{i+1/2}) dp dt \\ & - \frac{1}{|\Lambda_{j,i}|} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{p_{j-1/2}}^{p_{j+1/2}} (\mathcal{V}f)(t, p, r_{i-1/2}) dp dt = 0. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Si se definen los flujos numéricos

$$F_{j,i+1/2}^n \approx \frac{1}{\Delta t \Delta p} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{p_{j-1/2}}^{p_{j+1/2}} (\mathcal{V}f)(t, p, r_{i+1/2}) dp dt, \quad (3.3)$$

para $j \in \{0, \dots, J\}$, $i \in \{-1, \dots, I\}$, y además se utilizan las definiciones dadas en (3.1) y (3.3), la ecuación (3.2) permite obtener

$$f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) = 0,$$

o, equivalentemente,

$$f_{j,i}^{n+1} = f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n), \quad j \in \{0, \dots, J\}, \quad i \in \{0, \dots, I\}, \quad (3.4)$$

lo cual corresponde a un esquema conservativo.

Por otro lado, se debe encontrar valores que aproximen a u , dados por

$$u^n \approx u(t_n),$$

para $n \in \{0, \dots, N-1\}$. De la ecuación (2.7b), se propone

$$u^n = \rho - \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j f_{j,i}^n \Delta r \Delta p, \quad n \in \{0, \dots, N\},$$

cuyos valores serán necesarios para calcular los flujos numéricos $F_{j,i+1/2}^n$ que dependen de $\mathcal{V}$ y, a su vez, éste último depende de u . Con esto, se encuentra una solución que aproxime a u dada por

$$u_h := \sum_{n=0}^{N-1} u^n \mathbf{1}_{[t_n, t_{n+1})}.$$

Los valores iniciales están dados por

$$f_{j,i}^0 = \frac{1}{|\Lambda_{j,i}|} \int_{\Lambda_{j,i}} f^{in}(p, r) dr dp, \quad j \in \{0, \dots, J\}, i \in \{0, \dots, I\}, \quad (3.5a)$$

$$u^0 = u^{in}. \quad (3.5b)$$

A partir del esquema explícito (3.4) se pueden proponer distintos esquemas numéricos, donde la diferencia entre uno y otro está en definir cómo calcular los flujos numéricos.

En este documento se utiliza un flujo similar al de Engquist-Osher, como aparece en (Leveque, 2002). Para ello, se hace necesario definir

$$\mathcal{V}_{j,i+1/2}^n := \mathcal{V}(u^n, p_j, r_{i+1/2}), \quad i \in \{-1, 0, \dots, I\}, \quad j \in \{0, \dots, J\}.$$

Luego, se define el flujo

$$F_{j,i+1/2}^n = \begin{cases} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n f_{j,i}^n, & \text{si } \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n \geq 0, \\ \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n f_{j,i+1}^n, & \text{si } \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n < 0, \end{cases}$$

el cual se puede escribir como

$$F_{j,i+1/2}^n = \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n, \quad i \in \{0, \dots, I-1\}, \quad j \in \{0, \dots, J\}, \quad (3.6)$$

donde

$$\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} := \max(\mathcal{V}_{j,i+1/2}^n, 0),$$

$$\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} := -\min(\mathcal{V}_{j,i+1/2}^n, 0),$$

es decir, $\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+}$ y $\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-}$ corresponden a la parte positiva y la parte negativa de $\mathcal{V}_{j,i+1/2}^n$, respectivamente.

Para el flujo en los extremos, se impone

$$F_{j,-1/2}^n = F_{j,I+1/2}^n = 0.$$

Resumiendo, el problema discretizado consiste en:

Encontrar (f_h, u_h) , con

$$f_h := \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I f_{j,i}^n \mathbf{1}_{[t_n, t_{n+1}) \times \Lambda_{j,i}},$$

$$u_h := \sum_{n=0}^{N-1} u^n \mathbf{1}_{[t_n, t_{n+1})},$$

tales que para $n \in \{0, \dots, N-1\}$,

$$f_{j,i}^{n+1} = f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n), \quad j \in \{0, \dots, J\}, \quad i \in \{0, \dots, I\},$$

$$u^n = \rho - \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j f_{j,i}^n \Delta r \Delta p,$$

$$F_{j,i+1/2}^n = \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n, \quad j \in \{0, \dots, J\}, \quad i \in \{0, \dots, I-1\},$$

$$F_{j,-1/2}^n = 0, \quad j \in \{0, \dots, J\},$$

$$F_{j,I+1/2}^n = 0, \quad j \in \{0, \dots, J\}, \quad (3.7)$$

y además

$$f_{j,i}^0 = \frac{1}{|\Lambda_{j,i}|} \int_{\Lambda_{j,i}} f^{in}(p, r) dr dp, \quad j \in \{0, \dots, J\}, \quad i \in \{0, \dots, I\},$$

$$u^0 = u^{in}. \quad (3.8)$$

3.3. Declaración de la convergencia

Para establecer el teorema que asegura la convergencia del esquema numérico (3.7)-(3.8), se requieren las siguientes hipótesis.

(H1) Para la distribución inicial se tiene $f^{in} \in W^{1,1}(\mathcal{S}_P) \cap L^\infty(\mathcal{S}_P)$, con $f^{in}(p, r) \geq 0, \forall (p, r) \in \mathcal{S}_P$. Además $u^{in} \geq 0$, con

$$u^{in} + \int_{\mathcal{S}_P} r p f^{in}(p, r) dr dp = \rho.$$

(H2) Las tasas de adsorción y desorción satisfacen $k, l \in W^{2,\infty}(\mathcal{S}_P)$, con $k(p, r) \geq 0$ y $l(p, r) \geq 0, \forall (p, r) \in \mathcal{S}_P$. Los términos $\tilde{K}$ y $\tilde{L}$ son valores positivos tales que

$$\|k\|_{L^\infty(\mathcal{S}_P)} = \tilde{K}, \quad \|l\|_{L^\infty(\mathcal{S}_P)} = \tilde{L}. \quad (3.9)$$

(H3) Para la tasas de adsorción y desorción se tiene que $k(p, r = 1) = 0$ y $l(p, r = 0) = 0$, respectivamente, para $p \in [0, P]$.

(H4) Se propone la condición CFL (*Courant-Friedrichs-Levy*)

$$2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \|\mathcal{V}\|_{L^\infty((0, \rho) \times \mathcal{S}_P)} < 1. \quad (3.10)$$

(H5) Por último, se supone la condición

$$\tilde{K} P M^{in} \Delta t < 1, \quad (3.11)$$

donde

$$M^{in} := \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) dr dp.$$

Observar que para $\mathcal{V}$, en la condición (3.10), se considera la primera variable sólo dentro de un intervalo $(0, \rho)$. Esto es debido a que $u_h(t)$ posee valores sólo dentro de dicho intervalo, para $t \in [0, T]$, tal como se demuestra posteriormente en la proposición 4.3. Además, la hipótesis (H3) es equivalente a decir que

$$\mathcal{V}(u, p, r = 0) \geq 0, \quad \mathcal{V}(u, p, r = 1) \leq 0, \quad (3.12)$$

para $(p, r) \in \mathcal{S}_P$. Esta hipótesis se impone para que el problema tenga sentido físico, pues un polímero sin iones de metal no puede experimentar desorción, es decir $l(p, r = 0) = 0$, y un polímero lleno de iones de metal no puede experimentar adsorción, de donde $k(p, r = 1) = 0$.

De aquí en adelante, se dan por supuestas las hipótesis ya mencionadas, por lo cual no es necesario mencionarlas de nuevo. Se establece, de esta forma, el siguiente teorema.

Teorema 3.1 (Convergencia del esquema numérico). *Sea $\{(f_h, u_h)\}$ una familia de soluciones del esquema numérico (3.7)-(3.8). Entonces, existen $f \in \mathcal{C}([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P))$, $u \in \mathcal{C}([0, T])$ y una subsucesión $(f_h, u_h)_h$ tales que*

$$\begin{aligned} f_h &\rightarrow f \text{ en } L^\infty([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P)), \\ u_h &\rightarrow u \text{ en } L^\infty([0, T]), \end{aligned} \quad (3.13)$$

cuando $|h| \rightarrow 0$, y (f, u) es solución de (2.8).

La demostración del teorema 3.1 se muestra en el capítulo 5, cuyo desarrollo necesita de las propiedades expuestas en el capítulo 4.

Capítulo 4

Propiedades del esquema numérico

Este capítulo se divide en dos secciones: una dedicada a demostrar la estabilidad L^∞ del esquema numérico y la otra a probar que su solución posee variación total acotada. Así, la sección 4.1 asegura que la solución numérica siempre entrega valores que están acotados por las mismas cantidades fijas, independiente de cuán fina sea la malla. La sección 4.2, en cambio, propone cotas para la variación total de $f(t, \cdot, \cdot)$, para cada $t \in [0, T)$, para cada variable r y p por separado, siendo éstas utilizadas para acotar la variación total global de f_h por un valor que no depende de la malla de discretización.

Para ambas secciones, se hace necesario definir las *derivadas discretas* de $\mathcal{V}$, dadas por

$$A_{j,i}^n := \frac{\mathcal{V}_{j,i+1/2}^n - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^n}{\Delta r}, \quad \begin{array}{l} j \in \{0, \dots, J\}, \\ i \in \{0, \dots, I\}, \end{array}$$

$$B_{j+1/2,i+1/2}^n := \frac{\mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n}{\Delta p}, \quad \begin{array}{l} j \in \{0, \dots, J-1\}, \\ i \in \{-1, \dots, I\}, \end{array}$$

además de los términos

$$A_{j,i}^{n+} := \frac{\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+}}{\Delta r}, \quad A_{j,i}^{n-} := \frac{\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-}}{\Delta r}, \quad \begin{array}{l} j \in \{0, \dots, J\}, \\ i \in \{0, \dots, I\}, \end{array}$$

$$B_{j+1/2,i+1/2}^{n+} := \frac{\mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+}}{\Delta p}, \quad B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} := \frac{\mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n-} - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-}}{\Delta p}, \quad \begin{array}{l} j \in \{0, \dots, J-1\}, \\ i \in \{-1, \dots, I\}. \end{array}$$

4.1. Estabilidad

Para demostrar la estabilidad L^∞ de u_h , es necesario introducir los momentos discretos y probar que éstos se conservan en el tiempo.

Proposición 4.1 (Conservación de los momentos). *Se definen los momentos discretos de orden 0 y 1*

$$M_{0,h}^n := \sum_{j=0}^J \sum_{i=1}^I f_{j,i}^n \Delta p \Delta r, \quad M_{1,h}^n := \sum_{j=0}^J \sum_{i=1}^I p_j f_{j,i}^n \Delta p \Delta r,$$

respectivamente. Dichos momentos satisfacen las igualdades

$$M_{0,h}^n = M_{0,h}^0 = M^{in}, \quad M_{1,h}^n = M_{1,h}^0,$$

para todo $n \in \mathbb{N}$.

Demostración. Observar que

$$\sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) = 0$$

para todo $j \in \{0, \dots, J\}$. Luego,

$$\begin{aligned} M_{0,h}^{n+1} &= \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I f_{j,i}^{n+1} \Delta p \Delta r \\ &= \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \left(f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) \right) \Delta p \Delta r \\ &= \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I f_{j,i}^n \Delta p \Delta r - \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) \Delta p \Delta r \\ &= M_{0,h}^n \end{aligned}$$

La igualdad $M_{0,h}^n = M^{in}$ se obtiene directamente de la definición de $f_{j,i}^0$. Por otro lado,

$$\begin{aligned} M_{1,h}^{n+1} &= \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I p_j f_{j,i}^{n+1} \Delta p \Delta r \\ &= \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I p_j \left(f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) \right) \Delta p \Delta r \\ &= \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I p_j f_{j,i}^n \Delta p \Delta r - \sum_{j=0}^J p_j \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) \Delta p \Delta r \\ &= M_{1,h}^n, \end{aligned}$$

de donde quedan demostradas ambas igualdades. □

Por comodidad de los cálculos que siguen, se definen los valores exteriores de f_h

$$\begin{aligned} f_{j,-1}^n &:= 0, \quad f_{j,I+1}^n := 0, \quad j \in \{-1, \dots, J+1\}, \\ f_{-1,i}^n &:= 0, \quad f_{J+1,i}^n := 0, \quad i \in \{-1, \dots, I+1\}. \end{aligned}$$

Proposición 4.2 (No negatividad de f_h y u_h). *Para todo $n \in \{0, \dots, N-1\}$ se satisface*

$$\begin{aligned} f_{j,i}^n &\geq 0, \quad j \in \{0, \dots, J\}, \quad i \in \{0, \dots, I\}, \\ u^n &\geq 0. \end{aligned}$$

Demostración. Es sabido que

$$f_{j,i}^0 := \frac{1}{\Lambda_{j,i}} \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) dr dp \geq 0.$$

Si se fija $n \in \{0, \dots, N-2\}$, y además se supone que $f_{j,i}^n \geq 0$, se puede observar que

$$F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n = \left(\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n \right) - \left(\mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} f_{j,i}^n \right),$$

debido a la definición de los flujos numéricos. Luego,

$$\begin{aligned} f_{j,i}^{n+1} &= f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) \\ &= f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left[\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} f_{j,i}^n \right] \\ &= \frac{1}{2} \left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} \right) f_{j,i}^n + \frac{1}{2} \left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} \right) f_{j,i}^n \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n \right) \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

debido a que la condición CFL (3.10) implica que

$$\left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} \right) > 0, \quad \left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} \right) > 0.$$

Como además $f_{j,i}^0 \geq 0$, por inducción se tiene que $f_{j,i}^n \geq 0$, para todo $n \in \{0, \dots, N-1\}$.

Por otra parte, se fija nuevamente $n \in \{0, \dots, N-2\}$ y se supone que $u^n \geq 0$. Por definición, se sabe que

$$u^n := \rho - \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j f_{j,i}^n \Delta r \Delta p,$$

de donde

$$\begin{aligned}
u^{n+1} &= \rho - \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j f_{j,i}^{n+1} \Delta r \Delta p \\
&= \rho - \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j \left[f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) \right] \Delta r \Delta p \\
&= u^n + \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) \Delta t \Delta p.
\end{aligned}$$

Recordando que $F_{j,-1/2}^n = F_{j,I+1/2}^n = 0$,

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^I r_i (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) &= \sum_{i=0}^I r_i F_{j,i+1/2}^n - \sum_{i=0}^I r_i F_{j,i-1/2}^n \\
&= \sum_{i=1}^{I+1} r_{i-1} F_{j,i-1/2}^n - \sum_{i=0}^I r_i F_{j,i-1/2}^n \\
&= \sum_{i=0}^I r_{i-1} F_{j,i-1/2}^n - \sum_{i=0}^I r_i F_{j,i-1/2}^n \\
&= - \sum_{i=0}^I F_{j,i-1/2}^n \Delta r.
\end{aligned}$$

Luego,

$$u^{n+1} = u^n - \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I p_j F_{j,i-1/2}^n \Delta r \Delta p \Delta t. \quad (4.1)$$

Notar que

$$\mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} \leq \tilde{K} u^n,$$

por lo cual, de la definición de $F_{j,i-1/2}^n$ en (3.6) y de la nonegatividad de los valores $f_{j,i}^n$ recientemente obtenida,

$$F_{j,i-1/2}^n \leq \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n \leq \tilde{K} u^n f_{j,i-1}^n,$$

de donde, utilizando en (4.1), resulta la desigualdad

$$u^{n+1} \geq u^n - \tilde{K} u^n P \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I f_{j,i-1}^n \Delta r \Delta p \Delta t$$

$$\begin{aligned}
&\geq u^n - \tilde{K} u^n P M_{0,h}^n \Delta t \\
&= u^n - \tilde{K} u^n P M^{in} \Delta t,
\end{aligned}$$

es decir,

$$u^{n+1} \geq (1 - \tilde{K} P M^{in} \Delta t) u^n. \quad (4.2)$$

De (3.11) se sabe que $(1 - \tilde{K} P M^{in} \Delta t) > 0$. Con la suposición $u^n \geq 0$, se tiene que $u^{n+1} \geq 0$. Dado que $u^0 = u^{in} \geq 0$, por inducción se obtiene que $u^n \geq 0$, para todo $n \in \{0, \dots, N-1\}$. $\square$

Proposición 4.3. *[Estabilidad L^∞ para u_h] Los valores u^n , para $n \in \{0, \dots, N-1\}$, satisfacen*

$$0 \leq u^n \leq \rho. \quad (4.3)$$

Además, existe una constante $C > 0$, independiente de n , tal que

$$|u^{n+1} - u^n| \leq C \Delta t. \quad (4.4)$$

Demostración. Si $n \in \{0, \dots, N-1\}$, por proposición 4.2 se sabe que u^n y f^n son no negativos, por lo cual, si se toma en cuenta que

$$u^n + \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j f_{j,i}^n \Delta r \Delta p = \rho,$$

entonces es evidente que $u^n \leq \rho$.

Por otro lado, si se procede de forma análoga a la obtención de (4.2), utilizando el hecho de que

$$F_{j,i-1/2}^n \geq -\mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} f_{j,i}^n,$$

de (4.1) se tiene

$$\begin{aligned}
u^{n+1} &\leq u^n + P \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} f_{j,i}^n \Delta r \Delta p \Delta t \\
&\leq u^n + (\tilde{K} \rho + \tilde{L}) P \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I f_{j,i}^n \Delta r \Delta p \Delta t \\
&= u^n + (\tilde{K} \rho + \tilde{L}) P M^{in} \Delta t,
\end{aligned} \quad (4.5)$$

y además, (4.2) permite saber que

$$u^{n+1} \geq u^n - \tilde{K} u^n P M^{in} \Delta t \geq u^n - (\tilde{K} \rho + \tilde{L}) P M^{in} \Delta t. \quad (4.6)$$

Así, utilizando (4.5) y (4.6), se obtiene la desigualdad

$$-(\tilde{K}\rho + \tilde{L})PM^{in}\Delta t \leq u^{n+1} - u^n \leq (\tilde{K}\rho + \tilde{L})PM^{in}\Delta t,$$

lo cual es equivalente a

$$|u^{n+1} - u^n| \leq (\tilde{K}\rho + \tilde{L})PM^{in}\Delta t,$$

demostrando (4.4). $\square$

Observación 4.4. De la proposición 4.3 se sabe que u^n está acotado, por lo cual, sumado a que $k, l \in W^{2,\infty}(\mathcal{S}_P)$, se tiene que existe una constante $K > 0$, independiente de n , tal que satisface diversas desigualdades, por ejemplo

$$|\mathcal{V}_{j,i+1/2}^n| < K, \quad \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} < K, \quad \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} < K, \quad (4.7)$$

$$|A_{j,i}^n| < K, \quad |A_{j,i}^{n+}| < K, \quad |A_{j,i}^{n-}| < K, \quad (4.8)$$

$$|B_{j+1/2,i+1/2}^n| < K, \quad |B_{j+1/2,i+1/2}^{n+}| < K, \quad |B_{j+1/2,i+1/2}^{n-}| < K, \quad (4.9)$$

$$\frac{|A_{j,i+1}^n - A_{j,i}^n|}{\Delta r} < K, \quad \frac{|A_{j+1,i+1}^n - A_{j,i+1}^n|}{\Delta p} < K. \quad (4.10)$$

De aquí en adelante, la constante $K > 0$ siempre se refiere a la cota recién mencionada.

Para f_h , la estabilidad se expone en la proposición 4.5, cuya demostración para la cota superior se realiza de una forma similar al lema 3.2 de (Filbet y Laurençot, 2003).

Proposición 4.5. [Estabilidad L^∞ para f_h] Los valores $f_{j,i}^n$, para $n \in \{0, \dots, N-1\}$, $j \in \{0, \dots, J\}$, $i \in \{0, \dots, I\}$, satisfacen

$$0 \leq f_{j,i}^n \leq e^{KT} \|f^{in}\|_{L^\infty(\mathcal{S}_P)}. \quad (4.11)$$

Además, existe una constante $C > 0$, independiente de n , tal que

$$\sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I |f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n| \Delta p \Delta r \leq C \Delta t. \quad (4.12)$$

Demostración. Del esquema numérico, se puede escribir

$$\begin{aligned} f_{j,i}^{n+1} &= f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) \\ &= f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left[\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} f_{j,i}^n \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} \right) f_{j,i}^n + 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \left[\left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} \right) f_{j,i}^n + 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n \right] + \frac{\Delta t}{\Delta r} (\mathcal{V}_{j,i-1/2}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n) f_{j,i}^n \\
& \leq \frac{1}{2} \left[\left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} \right) f_{j,i}^n + 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n \right] \\
& + \frac{1}{2} \left[\left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} \right) f_{j,i}^n + 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n \right] + K \Delta t f_{j,i}^n, \tag{4.13}
\end{aligned}$$

donde en el último paso se utilizó (4.8). Ahora, se definen las constantes

$$\begin{aligned}
\lambda_{j,i}^1 &:= \frac{1}{2} \left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} \right), & \lambda_{j,i}^2 &:= \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-}, \\
\lambda_{j,i}^3 &:= \frac{1}{2} \left(1 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} \right), & \lambda_{j,i}^4 &:= \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+}, & \lambda_{j,i}^5 &:= K \Delta t,
\end{aligned}$$

a partir de las cuales se puede definir

$$\tilde{\lambda}_{j,i}^k := \frac{\lambda_{j,i}^k}{(1 + K \Delta t)},$$

para $k \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$. Notar que, nuevamente gracias a la condición CFL, estas constantes son todas no negativas, y además satisfacen

$$\sum_{k=1}^5 \tilde{\lambda}_{j,i}^k = 1.$$

Entonces, la desigualdad (4.13) se puede reescribir como

$$\frac{f_{j,i}^{n+1}}{(1 + K \Delta t)} \leq \tilde{\lambda}_{j,i}^1 f_{j,i}^n + \tilde{\lambda}_{j,i}^2 f_{j,i+1}^n + \tilde{\lambda}_{j,i}^3 f_{j,i}^n + \tilde{\lambda}_{j,i}^4 f_{j,i-1}^n + \tilde{\lambda}_{j,i}^5 f_{j,i}^n,$$

lo cual muestra que $f_{j,i}^{n+1}/(1 + K \Delta t)$ es una combinación convexa de $f_{j,i-1}^n$, $f_{j,i}^n$ y $f_{j,i+1}^n$. En consecuencia, se tiene que

$$f_{j,i}^{n+1} \leq (1 + K \Delta t) \sup_i \{f_{j,i}^n\}, \tag{4.14}$$

y si además se toma el supremo con respecto a j , se tiene que

$$f_{j,i}^{n+1} \leq (1 + K \Delta t) \sup_{j,i} \{f_{j,i}^n\},$$

de donde

$$f_{j,i}^n \leq (1 + K \Delta t)^n \sup_{j,i} \{f_{j,i}^0\} \leq e^{Kn \Delta t} \sup_{j,i} \{f_{j,i}^0\} \leq e^{KT} \|f^{in}\|_{L^\infty(\mathcal{S}_P)},$$

De esta forma, se concluye que

$$0 \leq f_{j,i}^n \leq e^{KT} \|f^{in}\|_{L^\infty(\mathcal{S}_P)},$$

para $i \in \{0, \dots, I\}$, $j \in \{0, \dots, J\}$, $n \in \{0, \dots, N-1\}$.

Por otra parte, es evidente que

$$\begin{aligned} |f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n| \Delta p \Delta r &= |F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n| \Delta p \Delta t \\ &= \left| \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} f_{j,i}^n \right| \Delta p \Delta t, \end{aligned}$$

de donde

$$\sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I |f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n| \Delta p \Delta r \leq 4M^{in} P \sup_u \|\mathcal{V}(u, \cdot)\|_{L^\infty(\mathcal{S}_P)} \Delta t,$$

lo cual demuestra (4.12). $\square$

4.2. Variación total acotada

Se define a continuación la variación total de una función y el espacio de funciones de variación acotada.

Definición 4.6. (Godlewski y Raviart, 1991) Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un abierto. Dada una función $g \in L_{loc}^1(\Omega)$, se define la *variación total* de g

$$TV(g) := \sup \left\{ \int_{\Omega} g \operatorname{div} \varphi dx, \varphi \in C_0^1(\Omega)^n, \|\varphi\|_{L^\infty} \leq 1 \right\}.$$

Además, se define el espacio de las funciones de *variación acotada*

$$BV(\Omega) := \{g \in L_{loc}^1(\Omega) : TV(g) < +\infty\}.$$

En esta sección se demuestra que, para cada $t \in [0, T)$, $f_h(t, \cdot, \cdot) \in BV(\mathcal{S}_P)$, es decir, $f_h(t, \cdot, \cdot)$ posee variación total acotada. Esta propiedad es útil para demostrar resultados de compacidad en el capítulo 5.

Dado que interesa analizar la variación total de $f_h(t, \cdot, \cdot)$, se define

$$f^n := f_h(t, \cdot, \cdot), \quad \text{para algún } t \in [t_n, t_{n+1}).$$

Para este caso, utilizando la definición 4.6 de la variación acotada, se puede escribir

$$TV(f^n) = \sum_{i,j} \{ \Delta p |f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n| + \Delta r |f_{j+1,i}^n - f_{j,i}^n| \}, \quad (4.15)$$

tal como se menciona en (Godlewski y Raviart, 1996) para cualquier caso discreto en dos variables. Luego, se definen también

$$g_{j,i+1/2}^n := \frac{f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n}{\Delta r}, \quad i \in \{-1, \dots, I\}, \quad j \in \{0, \dots, J\},$$

$$h_{j+1/2,i}^n := \frac{f_{j+1,i}^n - f_{j,i}^n}{\Delta p}, \quad i \in \{0, \dots, I\}, \quad j \in \{-1, \dots, J\}.$$

Por lo tanto, se utiliza la notación

$$TV_p(f^n) := \sum_{j=-1}^J \sum_{i=0}^I |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p \Delta r, \quad TV_r(f^n) := \sum_{j=0}^J \sum_{i=-1}^I |g_{j,i+1/2}^n| \Delta p \Delta r,$$

para escribir (4.15) en la forma

$$TV(f^n) = TV_p(f^n) + TV_r(f^n).$$

Entonces, para demostrar que f^n es de variación acotada en $\mathcal{S}_P$, se buscan cotas para $TV_r(f^{n+1})$ y $TV_p(f^{n+1})$, dependientes de f^n , en las proposiciones 4.7 y 4.8, respectivamente, para utilizarlas en la demostración del lema 4.9, el cual propone una cota para $TV(f^{n+1})$ independiente de n .

4.2.1. Cota para la variación total en r

Proposición 4.7. *Para todo $n \in \mathbb{N}$, se satisface la desigualdad*

$$TV_r(f^{n+1}) \leq (1 + K \Delta t) TV_r(f^n) + K \Delta t M^{in}.$$

Demostración. Dado que

$$TV_r(f^{n+1}) = \sum_{j=0}^J \sum_{i=-1}^I |g_{j,i+1/2}^{n+1}| \Delta p \Delta r,$$

en esta demostración se fija $j \in \{0, \dots, J\}$ y se acota el término

$$\sum_{i=-1}^I |g_{j,i+1/2}^{n+1}| \Delta r,$$

para luego multiplicar por Δp y sumar para cada índice $j \in \{0, \dots, J\}$, obteniendo así una cota para $TV_r(f^{n+1})$.

Para acotar aquel término, se descompone en la forma

$$\sum_{i=-1}^I |g_{j,i+1/2}^{n+1}| \Delta r = \underbrace{\sum_{i=0}^{I-2} |g_{j,i+1/2}^{n+1}| \Delta r}_{(I)} + \underbrace{|g_{j,1/2}^{n+1}| \Delta r}_{(II)} + \underbrace{|g_{j,I-1/2}^{n+1}| \Delta r}_{(III)} + \underbrace{|g_{j,-1/2}^{n+1}| \Delta r}_{(IV)} + \underbrace{|g_{j,I+1/2}^{n+1}| \Delta r}_{(V)}$$

y se acota cada término del lado derecho por separado, los cuales están enumerados para mayor claridad.

(I) Cota para $\sum_{i=0}^{I-2} |g_{j,i+1/2}^{n+1}| \Delta r$.

Para $i \in \{1, \dots, I-1\}$,

$$\begin{aligned} f_{j,i}^{n+1} &= f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{j,i+1/2}^n - F_{j,i-1/2}^n) \\ &= f_{j,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} f_{j,i+1}^n - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} f_{j,i}^n) \\ &= f_{j,i}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} (f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n) + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} (f_{j,i-1}^n - f_{j,i}^n) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta r} (\mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-}) f_{j,i}^n. \end{aligned}$$

Luego

$$f_{j,i}^{n+1} = f_{j,i}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} g_{j,i+1/2}^n \Delta r - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} g_{j,i-1/2}^n \Delta r - \Delta t A_{j,i}^n f_{j,i}^n, \quad (4.16)$$

lo cual se puede escribir también para $i+1$ en la forma

$$f_{j,i+1}^{n+1} = f_{j,i+1}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+3/2}^{n-} g_{j,i+3/2}^n \Delta r - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} g_{j,i+1/2}^n \Delta r - \Delta t A_{j,i+1}^n f_{j,i+1}^n. \quad (4.17)$$

Si a (4.17) se le resta (4.16), resulta

$$\begin{aligned} g_{j,i+1/2}^{n+1} \Delta r &= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-}\right) g_{j,i+1/2}^n \Delta r \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+3/2}^{n-} g_{j,i+3/2}^n \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} g_{j,i-1/2}^n \Delta r \\ &\quad + \Delta t (A_{j,i}^n - A_{j,i+1}^n) f_{j,i}^n - \Delta t A_{j,i+1}^n g_{j,i+1/2}^n \Delta r, \end{aligned}$$

de donde, aplicando valor absoluto y desigualdad triangular,

$$\begin{aligned} |g_{j,i+1/2}^{n+1}| \Delta r &\leq \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-}\right) |g_{j,i+1/2}^n| \Delta r \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+3/2}^{n-} |g_{j,i+3/2}^n| \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} |g_{j,i-1/2}^n| \Delta r \\ &\quad + \Delta t \frac{|A_{j,i}^n - A_{j,i+1}^n|}{\Delta r} f_{j,i}^n \Delta r + \Delta t |A_{j,i+1}^n g_{j,i+1/2}^n| \Delta r. \end{aligned}$$

para $i \in \{1, \dots, I-2\}$. De (4.10) y (4.8),

$$|g_{j,i+1/2}^{n+1}| \Delta r \leq \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-}\right) |g_{j,i+1/2}^n| \Delta r$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+3/2}^{n-} |g_{j,i+3/2}^n| \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} |g_{j,i-1/2}^n| \Delta r \\
& + K \Delta t f_{j,i}^n \Delta r + K \Delta t |g_{j,i+1/2}^n| \Delta r,
\end{aligned}$$

por lo cual, si se suma para $i = 1, \dots, I-2$, se obtiene

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{I-2} |g_{j,i+1/2}^{n+1}| \Delta r & \leq \sum_{i=1}^{I-2} \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} \right) |g_{j,i+1/2}^n| \Delta r \\
& + \sum_{i=1}^{I-2} \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+3/2}^{n-} |g_{j,i+3/2}^n| \Delta r + \sum_{i=1}^{I-2} \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} |g_{j,i-1/2}^n| \Delta r \\
& + \sum_{i=1}^{I-2} K \Delta t f_{j,i}^n \Delta r + \sum_{i=1}^{I-2} K \Delta t |g_{j,i+1/2}^n| \Delta r. \tag{4.18}
\end{aligned}$$

(II) Cota para $|g_{j,1/2}^{n+1}| \Delta r$.

Observar que

$$\begin{aligned}
f_{j,0}^{n+1} & = f_{j,0}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} F_{j,1/2}^n \\
& = f_{j,0}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(\mathcal{V}_{j,1/2}^{n+} f_{j,0}^n - \mathcal{V}_{j,1/2}^{n-} f_{j,1}^n \right) \\
& = f_{j,0}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(\mathcal{V}_{j,1/2}^{n+} f_{j,0}^n - \mathcal{V}_{j,1/2}^{n-} f_{j,1}^n - \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n+} f_{j,-1}^n + \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-} f_{j,0}^n \right), \tag{4.19}
\end{aligned}$$

debido a que $\mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-} = 0$, por (3.12). Similar a como se hizo para $i = 1, \dots, I-2$, se tiene para este caso

$$f_{j,0}^{n+1} = f_{j,0}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n-} g_{j,1/2}^n \Delta r - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n+} g_{j,-1/2}^n \Delta r - \Delta t A_{j,0}^n f_{j,0}^n. \tag{4.20}$$

Además, de (4.16) se sabe que

$$f_{j,1}^{n+1} = f_{j,1}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,3/2}^{n-} g_{j,3/2}^n \Delta r - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n+} g_{j,1/2}^n \Delta r - \Delta t A_{j,1}^n f_{j,1}^n. \tag{4.21}$$

Restando (4.21) y (4.20),

$$\begin{aligned}
g_{j,1/2}^{n+1} \Delta r & = \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n-} \right) g_{j,1/2}^n \Delta r \\
& + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,3/2}^{n-} g_{j,3/2}^n \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n+} g_{j,-1/2}^n \Delta r
\end{aligned}$$

$$+ \Delta t \frac{(A_{j,0}^n - A_{j,1}^n)}{\Delta r} f_{j,0}^n - \Delta t A_{j,1}^n g_{j,1/2}^n \Delta r,$$

de donde

$$\begin{aligned} |g_{j,1/2}^{n+1}| \Delta r &\leq \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n-}\right) |g_{j,1/2}^n| \Delta r \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,3/2}^{n-} |g_{j,3/2}^n| \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n+} |g_{j,-1/2}^n| \Delta r \\ &+ K \Delta t f_{j,0}^n \Delta r + K \Delta t |g_{j,1/2}^n| \Delta r. \end{aligned} \quad (4.22)$$

(III) Cota para $|g_{j,I-1/2}^{n+1}| \Delta r$.

De la misma forma que el caso anterior,

$$\begin{aligned} f_{j,I}^{n+1} &= f_{j,I}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} F_{j,I-1/2}^n \\ &= f_{j,I}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(-\mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} f_{j,I-1}^n + \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n-} f_{j,I}^n \right) \\ &= f_{j,I}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(\mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n+} f_{j,I}^n - \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n-} f_{j,I+1}^n - \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} f_{j,I-1}^n + \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n-} f_{j,I}^n \right), \end{aligned} \quad (4.23)$$

debido a que $\mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n+} = 0$. Entonces, se tiene que

$$f_{j,I}^{n+1} = f_{j,I}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n-} g_{j,I+1/2}^n \Delta r - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} g_{j,I-1/2}^n \Delta r - \Delta t A_{j,I}^n f_{j,I}^n. \quad (4.24)$$

Además, de (4.16) se sabe que

$$f_{j,I-1}^{n+1} = f_{j,I-1}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n-} g_{j,I-1/2}^n \Delta r - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-3/2}^{n+} g_{j,I-3/2}^n \Delta r - \Delta t A_{j,I-1}^n f_{j,I-1}^n. \quad (4.25)$$

Restando (4.24) y (4.25),

$$\begin{aligned} g_{j,I-1/2}^{n+1} \Delta r &= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n-}\right) g_{j,I-1/2}^n \Delta r \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n-} g_{j,I+1/2}^n \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-3/2}^{n+} g_{j,I-3/2}^n \Delta r \\ &+ \Delta t \frac{(A_{j,I-1}^n - A_{j,I}^n)}{\Delta r} f_{j,I-1}^n - \Delta t A_{j,I}^n g_{j,I-1/2}^n \Delta r, \end{aligned}$$

de donde

$$|g_{j,I-1/2}^{n+1}| \Delta r \leq \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n-}\right) |g_{j,I-1/2}^n| \Delta r$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n-} |g_{j,I+1/2}^n| \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-3/2}^{n+} |g_{j,I-3/2}^n| \Delta r \\
& + K \Delta t f_{j,I-1}^n \Delta r + K \Delta t |g_{j,I-1/2}^n| \Delta r.
\end{aligned} \tag{4.26}$$

(IV) Cota para $|g_{j,-1/2}^{n+1}| \Delta r$.

De (4.19), se tiene que

$$\begin{aligned}
|g_{j,-1/2}^{n+1}| \Delta r &= f_{j,0}^{n+1} \\
&= f_{j,0}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(\mathcal{V}_{j,1/2}^{n+} f_{j,0}^n - \mathcal{V}_{j,1/2}^{n-} f_{j,1}^n - \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n+} f_{j,-1}^n + \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-} f_{j,0}^n \right) \\
&= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-} \right) f_{j,0}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n-} f_{j,1}^n \\
&= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-} \right) f_{j,0}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n-} (f_{j,1}^n - f_{j,0}^n) \\
&\quad + \Delta t \frac{(\mathcal{V}_{j,1/2}^{n-} - \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-})}{\Delta r} f_{j,0}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-} f_{j,0}^n,
\end{aligned}$$

de donde

$$\begin{aligned}
|g_{j,-1/2}^{n+1}| \Delta r &\leq \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-} \right) |g_{j,-1/2}^n| \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,1/2}^{n-} |g_{j,1/2}^n| \Delta r \\
&\quad + K \Delta t |g_{j,-1/2}^n| \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-} |g_{j,-1/2}^n| \Delta r.
\end{aligned} \tag{4.27}$$

(V) Cota para $|g_{j,I+1/2}^{n+1}| \Delta r$.

De (4.23), se tiene

$$\begin{aligned}
|g_{j,I+1/2}^{n+1}| \Delta r &= f_{j,I}^{n+1} \\
&= f_{j,I} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(\mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n+} f_{j,I}^n - \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n-} f_{j,I+1}^n - \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} f_{j,I-1}^n + \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n-} f_{j,I}^n \right) \\
&= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n-} \right) f_{j,I}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} f_{j,I-1}^n \\
&= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n-} \right) f_{j,I}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} (f_{j,I-1}^n - f_{j,I}^n) \\
&\quad + \Delta t \frac{(\mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} - \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n+})}{\Delta r} f_{j,I}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n+} f_{j,I}^n,
\end{aligned}$$

de donde

$$\begin{aligned} \left| g_{j,I+1/2}^{n+1} \right| \Delta r &\leq \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n-} \right) \left| g_{j,I+1/2}^n \right| \Delta + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I-1/2}^{n+} \left| g_{j,I-1/2}^n \right| \Delta r \\ &\quad + K \Delta t \left| g_{j,I+1/2}^n \right| \Delta r + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,I+1/2}^{n+} \left| g_{j,I+1/2}^n \right| \Delta r. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Sumando las cinco desigualdades (4.18), (4.22), (4.26), (4.27) y (4.28), se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_{i=-1}^I \left| g_{j,i+1/2}^{n+1} \right| \Delta r &\leq \sum_{i=-1}^I \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} \right) \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta r \\ &\quad + \sum_{i=-2}^{I-1} \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+3/2}^{n-} \left| g_{j,i+3/2}^n \right| \Delta r + \sum_{i=0}^{I+1} \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} \left| g_{j,i-1/2}^n \right| \Delta r \\ &\quad + \sum_{i=0}^{I-1} K \Delta t f_{j,i}^n \Delta r + \sum_{i=-1}^I K \Delta t \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta r. \end{aligned}$$

Cambiando los índices en las sumatorias, la desigualdad anterior se escribe de forma equivalente

$$\begin{aligned} \sum_{i=-1}^I \left| g_{j,i+1/2}^{n+1} \right| \Delta r &\leq \sum_{i=-1}^I \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} \right) \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta r \\ &\quad + \sum_{i=-1}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta r + \sum_{i=-1}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+} \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta r \\ &\quad + \sum_{i=0}^{I-1} K \Delta t f_{j,i}^n \Delta r + \sum_{i=-1}^I K \Delta t \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta r, \end{aligned}$$

cuyos términos del lado derecho se pueden, evidentemente, sumar para obtener

$$\sum_{i=-1}^I \left| g_{j,i+1/2}^{n+1} \right| \Delta r \leq (1 + K \Delta t) \sum_{i=-1}^I \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta r + \sum_{i=0}^{I-1} K \Delta t f_{j,i}^n \Delta r.$$

La desigualdad anterior se satisface para $j \in \{0, \dots, J\}$, por lo cual, si se aplica sumatoria sobre j y se multiplica por Δp , resulta

$$\sum_{j=0}^J \sum_{i=-1}^I \left| g_{j,i+1/2}^{n+1} \right| \Delta r \Delta p \leq (1 + K \Delta t) \sum_{j=0}^J \sum_{i=-1}^I \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta r \Delta p + \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^{I-1} K \Delta t f_{j,i}^n \Delta r \Delta p,$$

siendo equivalente a

$$TV_r(f^{n+1}) \leq (1 + K\Delta t)TV_r(f^n) + K\Delta tM^{in}, \quad (4.29)$$

recordando que

$$\sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I f_{j,i}^n \Delta r \Delta p = M_{0,h}^n = M_{0,h}^0 = M^{in},$$

debido a la proposición 4.1. □

4.2.2. Cota para la variación total en p

Proposición 4.8. *Para todo $n \in \mathbb{N}$, se satisface la desigualdad*

$$TV_p(f^{n+1}) \leq (1 + 2K\Delta t)TV_p(f^n) + 2K\Delta t \cdot TV_r(f^n) + K\Delta tM^{in}.$$

Demostración. Dado que

$$TV_p(f^{n+1}) = \sum_{j=-1}^J \sum_{i=0}^I \left| h_{j+1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p \Delta r,$$

se descompone el siguiente término

$$\sum_{j=-1}^J \sum_{i=0}^I \left| h_{j+1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p = \underbrace{\sum_{j=0}^{J-1} \sum_{i=0}^I \left| h_{j+1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p}_{(I)} + \underbrace{\sum_{i=0}^I \left| h_{1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p}_{(II)} + \underbrace{\sum_{i=0}^I \left| h_{J+1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p}_{(III)}$$

para proceder acotando cada término del lado derecho, sumando las desigualdades obtenidas y multiplicando por Δr .

$$(I) \text{ Cota para } \sum_{j=0}^{J-1} \sum_{i=0}^I \left| h_{j+1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p.$$

Sea $j \in \{0, \dots, J-1\}$. Primero, notar que

$$\begin{aligned} F_{j+1,i+1/2}^n - F_{j,i+1/2}^n &= \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} h_{j+1/2,i}^n \Delta p - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i+1}^n \Delta p \\ &\quad + (\mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n+}) f_{j,i}^n + (\mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} - \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n-}) f_{j+1,i+1}^n \\ &= \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} h_{j+1/2,i}^n \Delta p - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i+1}^n \Delta p \\ &\quad + B_{j+1/2,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n \Delta p - B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} f_{j+1,i+1}^n \Delta p. \end{aligned}$$

Sumando y restando $B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p^2$ en el lado derecho de la expresión anterior,

$$\begin{aligned} F_{j+1,i+1/2}^n - F_{j,i+1/2}^n &= \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} h_{j+1/2,i}^n \Delta p - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i+1}^n \Delta p \\ &\quad + B_{j+1/2,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n \Delta p - B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} f_{j+1,i+1}^n \Delta p \\ &\quad - B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p^2 - B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} f_{j,i}^n \Delta p \\ &\quad + B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} f_{j+1,i}^n \Delta p, \end{aligned}$$

y si se reordenan los términos resulta

$$\begin{aligned} F_{j+1,i+1/2}^n - F_{j,i+1/2}^n &= \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} h_{j+1/2,i}^n \Delta p - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i+1}^n \Delta p \\ &\quad + B_{j+1/2,i+1/2}^{n+} f_{j,i}^n \Delta p - B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} g_{j+1,i+1/2}^n \Delta p \Delta r \\ &\quad - B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p^2. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} -F_{j+1,i-1/2}^n + F_{j,i-1/2}^n &= -\mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} h_{j+1/2,i-1}^n \Delta p + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p \\ &\quad - (\mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+}) f_{j,i-1}^n - (\mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} - \mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n-}) f_{j+1,i}^n \\ &= -\mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} h_{j+1/2,i-1}^n \Delta p + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p \\ &\quad - B_{j+1/2,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n \Delta p + B_{j+1/2,i-1/2}^{n-} f_{j+1,i}^n \Delta p. \end{aligned}$$

Sumando y restando $B_{j+1/2,i-1/2}^n f_{j,i}^n \Delta p$, se tiene

$$\begin{aligned} -F_{j+1,i-1/2}^n + F_{j,i-1/2}^n &= -\mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} h_{j+1/2,i-1}^n \Delta p + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p \\ &\quad - B_{j+1/2,i-1/2}^{n+} f_{j,i-1}^n \Delta p + B_{j+1/2,i-1/2}^{n-} f_{j+1,i}^n \Delta p \\ &\quad + B_{j+1/2,i-1/2}^{n+} f_{j,i}^n \Delta p - B_{j+1/2,i-1/2}^{n-} f_{j,i}^n \Delta p \\ &\quad + B_{j+1/2,i-1/2}^n f_{j,i}^n \Delta p, \end{aligned}$$

y reordenando,

$$\begin{aligned} -F_{j+1,i-1/2}^n + F_{j,i-1/2}^n &= -\mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} h_{j+1/2,i-1}^n \Delta p + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p \\ &\quad + B_{j+1/2,i-1/2}^{n+} g_{j,i-1/2}^n \Delta p \Delta r + B_{j+1/2,i-1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p^2 \\ &\quad - B_{j+1/2,i-1/2}^n f_{j,i}^n \Delta p. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Por lo tanto, si se suman (4.30) y (4.31), se tiene que

$$F_{j+1,i+1/2}^n - F_{j,i+1/2}^n - F_{j+1,i-1/2}^n + F_{j,i-1/2}^n =$$

$$\begin{aligned}
& \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} h_{j+1/2,i}^n \Delta p - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i+1}^n \Delta p \\
& - \mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} h_{j+1/2,i-1}^n \Delta p + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p \\
& - B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} g_{j+1,i+1/2}^n \Delta p \Delta r + B_{j+1/2,i-1/2}^{n+} g_{j,i-1/2}^n \Delta p \Delta r \\
& + (B_{j+1/2,i-1/2}^{n-} - B_{j+1/2,i+1/2}^{n-}) h_{j+1/2,i}^n \Delta p^2 \\
& + (B_{j+1/2,i+1/2}^n - B_{j+1/2,i-1/2}^n) f_{j,i}^n \Delta p.
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Notar que

$$\begin{aligned}
(B_{j+1/2,i+1/2}^n - B_{j+1/2,i-1/2}^n) \Delta p &= \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n - \mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^n + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^n \\
&= (A_{j+1,i}^n - A_{j,i}^n) \Delta r,
\end{aligned}$$

y, de igual forma,

$$(B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} - B_{j+1/2,i-1/2}^{n-}) \Delta p = (A_{j+1,i}^{n-} - A_{j,i}^{n-}) \Delta r,$$

por lo cual (4.32) se escribe

$$\begin{aligned}
F_{j+1,i+1/2}^n - F_{j,i+1/2}^n - F_{j+1,i-1/2}^n + F_{j,i-1/2}^n &= \\
& \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} h_{j+1/2,i}^n \Delta p - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i+1}^n \Delta p \\
& - \mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} h_{j+1/2,i-1}^n \Delta p + \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} h_{j+1/2,i}^n \Delta p \\
& - B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} g_{j+1,i+1/2}^n \Delta p + B_{j+1/2,i-1/2}^{n+} g_{j,i-1/2}^n \Delta p \Delta r \\
& + (A_{j,i}^{n-} - A_{j+1,i}^{n-}) h_{j+1/2,i}^n \Delta p \Delta r + (A_{j+1,i}^n - A_{j,i}^n) f_{j,i}^n \Delta r.
\end{aligned}$$

Esta última expresión nos permite obtener, para $j \in \{0, \dots, J-1\}$, $i \in \{0, \dots, I\}$,

$$\begin{aligned}
h_{j+1/2,i}^{n+1} \Delta p &= h_{j+1/2,i}^n \Delta p - \frac{\Delta t}{\Delta r} [F_{j+1,i+1/2}^n - F_{j,i+1/2}^n - F_{j+1,i-1/2}^n + F_{j,i-1/2}^n] \\
&= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} \right) h_{j+1/2,i}^n \Delta p \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} h_{j+1/2,i+1}^n \Delta p + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} h_{j+1/2,i-1}^n \Delta p \\
&+ \Delta t B_{j+1/2,i+1/2}^{n-} g_{j+1,i+1/2}^n \Delta p - \Delta t B_{j+1/2,i-1/2}^{n+} g_{j,i-1/2}^n \Delta p \\
&+ \Delta t (A_{j+1,i}^{n-} - A_{j,i}^{n-}) h_{j+1/2,i}^n \Delta p + \Delta t \frac{(A_{j,i}^n - A_{j+1,i}^n)}{\Delta p} f_{j,i}^n \Delta p,
\end{aligned}$$

de donde, utilizando las ya conocidas cotas para las derivadas discretas, se tiene la desigualdad

$$\begin{aligned}
|h_{j+1/2,i}^{n+1}| \Delta p &\leq \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-}\right) |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} |h_{j+1/2,i+1}^n| \Delta p + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} |h_{j+1/2,i-1}^n| \Delta p \\
&+ K \Delta t |g_{j+1,i+1/2}^n| \Delta p + K \Delta t |g_{j,i-1/2}^n| \Delta p \\
&+ 2K \Delta t |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p + K \Delta t f_{j,i}^n \Delta p.
\end{aligned}$$

Si se suma para $i \in \{0, \dots, I\}$,

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^I |h_{j+1/2,i}^{n+1}| \Delta p &\leq \sum_{i=0}^I \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-}\right) |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p \\
&+ \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} |h_{j+1/2,i+1}^n| + \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i-1/2}^{n+} |h_{j+1/2,i-1}^n| \Delta p \\
&+ \sum_{i=0}^I K \Delta t |g_{j+1,i+1/2}^n| \Delta p + \sum_{i=0}^I K \Delta t |g_{j,i-1/2}^n| \Delta p \\
&+ \sum_{i=0}^I 2K \Delta t |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p + \sum_{i=0}^I K \Delta t f_{j,i}^n \Delta p,
\end{aligned}$$

lo cual se puede escribir en la forma

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^I |h_{j+1/2,i}^{n+1}| \Delta p &\leq \sum_{i=0}^I \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-}\right) |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p \\
&+ \sum_{i=1}^{I+1} \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p + \sum_{i=-1}^{I-1} \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p \\
&+ \sum_{i=0}^I K \Delta t |g_{j+1,i+1/2}^n| \Delta p + \sum_{i=-1}^{I-1} K \Delta t |g_{j,i+1/2}^n| \Delta p \\
&+ \sum_{i=0}^I 2K \Delta t |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p + \sum_{i=0}^I K \Delta t f_{j,i}^n \Delta p. \tag{4.33}
\end{aligned}$$

Como

$$\mathcal{V}_{j,-1/2}^{n-} = \mathcal{V}_{j+1,I+1/2}^{n+} = 0,$$

la desigualdad reciente se puede escribir

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^I \left| h_{j+1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p &\leq \sum_{i=0}^I \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} \right) \left| h_{j+1/2,i}^n \right| \Delta p \\
&+ \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n-} \left| h_{j+1/2,i}^n \right| \Delta p + \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j+1,i+1/2}^{n+} \left| h_{j+1/2,i}^n \right| \Delta p \\
&+ \sum_{i=0}^I K \Delta t \left| g_{j+1,i+1/2}^n \right| \Delta p + \sum_{i=-1}^{I-1} K \Delta t \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta p \\
&+ \sum_{i=0}^I 2K \Delta t \left| h_{j+1/2,i}^n \right| \Delta p + \sum_{i=0}^I K \Delta t f_{j,i}^n \Delta p. \tag{4.34}
\end{aligned}$$

Haciendo las sumas correspondientes en el lado derecho, se obtiene

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^I \left| h_{j+1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p &\leq (1 + 2K \Delta t) \sum_{i=0}^I \left| h_{j+1/2,i}^n \right| \Delta p + \sum_{i=0}^I K \Delta t \left| g_{j+1,i+1/2}^n \right| \Delta p \\
&+ \sum_{i=-1}^{I-1} K \Delta t \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta p + \sum_{i=0}^I K \Delta t f_{j,i}^n \Delta p. \tag{4.35}
\end{aligned}$$

Sumando para $j \in \{0, \dots, J-1\}$,

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^{J-1} \sum_{i=0}^I \left| h_{j+1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p &\leq (1 + 2K \Delta t) \sum_{j=0}^{J-1} \sum_{i=0}^I \left| h_{j+1/2,i}^n \right| \Delta p + \sum_{j=0}^{J-1} \sum_{i=0}^I K \Delta t \left| g_{j+1,i+1/2}^n \right| \Delta p \\
&+ \sum_{j=0}^{J-1} \sum_{i=-1}^{I-1} K \Delta t \left| g_{j,i+1/2}^n \right| \Delta p + \sum_{j=0}^{J-1} \sum_{i=0}^I K \Delta t f_{j,i}^n \Delta p. \tag{4.36}
\end{aligned}$$

(II) Cota para $\sum_{i=0}^I \left| h_{1/2,i}^{n+1} \right| \Delta p$.

Se tiene que

$$\begin{aligned}
h_{-1/2,i}^{n+1} \Delta p &= f_{0,i}^{n+1} \\
&= f_{0,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{0,i+1/2}^n - F_{0,i-1/2}^n) \\
&= f_{0,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(\mathcal{V}_{0,i+1/2}^{n+} f_{0,i}^n - \mathcal{V}_{0,i+1/2}^{n-} f_{0,i+1}^n - \mathcal{V}_{0,i-1/2}^{n+} f_{0,i-1}^n + \mathcal{V}_{0,i-1/2}^{n-} f_{0,i}^n \right)
\end{aligned}$$

$$= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i-1/2}^{n-}\right) f_{0,i}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i+1/2}^{n-} f_{0,i+1}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i-1/2}^{n+} f_{0,i-1}^n \quad (4.37)$$

para $i = 1, \dots, I-1$, por lo cual si se suman aquellos términos resulta

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^I h_{-1/2,i}^{n+1} \Delta p &= \sum_{i=1}^{I-1} \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i-1/2}^{n-}\right) f_{0,i}^n \\ &\quad + \sum_{i=2}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i-1/2}^{n-} f_{0,i}^n + \sum_{i=0}^{I-2} \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i+1/2}^{n+} f_{0,i}^n. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Además,

$$\begin{aligned} h_{-1/2,0}^{n+1} \Delta p &= f_{0,0}^{n+1} \\ &= f_{0,0}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (F_{0,1/2}^n) \\ &= f_{0,0}^n - \frac{\Delta t}{\Delta r} (\mathcal{V}_{0,1/2}^{n+} f_{0,0}^n - \mathcal{V}_{0,1/2}^{n-} f_{0,1}^n) \\ &= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,-1/2}^{n-}\right) f_{0,0}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,1/2}^{n-} f_{0,1}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,-1/2}^{n-} f_{0,0}^n, \end{aligned} \quad (4.39)$$

y de manera similar se obtiene

$$\begin{aligned} h_{-1/2,I}^{n+1} \Delta p &= f_{0,I}^{n+1} \\ &= \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,I+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,I-1/2}^{n-}\right) f_{0,I}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,I-1/2}^{n+} f_{0,I-1}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,I+1/2}^{n+} f_{0,I}^n, \end{aligned} \quad (4.40)$$

de donde, de (4.38), (4.39) y (4.40), se pueden sumar los términos para $i \in 0, \dots, I$, obteniéndose

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^I h_{-1/2,i}^{n+1} \Delta p &= \sum_{i=0}^I \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i+1/2}^{n+} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i-1/2}^{n-}\right) f_{0,i}^n \\ &\quad + \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i-1/2}^{n-} f_{0,i}^n + \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{0,i+1/2}^{n+} f_{0,i}^n \\ &= \sum_{i=1}^I f_{0,i}^n \end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^I h_{-1/2,i}^n \Delta p. \quad (4.41)$$

Luego,

$$\sum_{i=1}^I |h_{-1/2,i}^{n+1}| \Delta p = \sum_{i=1}^I |h_{-1/2,i}^n| \Delta p. \quad (4.42)$$

(III) *Cota para* $\sum_{i=0}^I |h_{J+1/2,i}^{n+1}| \Delta p.$

De forma análoga al desarrollo de la igualdad (4.42), se puede obtener

$$\sum_{i=1}^I |h_{J+1/2,i}^{n+1}| \Delta p = \sum_{i=1}^I |h_{J+1/2,i}^n| \Delta p. \quad (4.43)$$

Por lo tanto, utilizando (4.36), (4.42) y (4.43), se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_{j=-1}^J \sum_{i=0}^I |h_{j+1/2,i}^{n+1}| \Delta p &\leq (1 + 2K\Delta t) \sum_{j=-1}^J \sum_{i=0}^I |h_{j+1/2,i}^n| \Delta p + \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I K\Delta t |g_{j+1,i+1/2}^n| \Delta p \\ &\quad + \sum_{j=0}^J \sum_{i=-1}^{I-1} K\Delta t |g_{j,i+1/2}^n| \Delta p + \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I K\Delta t f_{j,i}^n \Delta p, \end{aligned} \quad (4.44)$$

de lo cual, multiplicando por Δr ,

$$TV_p(f^{n+1}) \leq (1 + 2K\Delta t)TV_p(f^n) + 2K\Delta t \cdot TV_r(f^n) + K\Delta t M^{in}, \quad (4.45)$$

recordando que $M_{0,h}^n = M_{0,h}^0 = M^{in}$ debido a la proposición 4.1. $\square$

4.2.3. Cota para la variación total global

Lema 4.9. *Para todo $n \in \mathbb{N}$, $f^n \in BV(\mathcal{S}_P)$, es decir, existe una constante $\overline{K} > 0$ independiente de h tal que*

$$TV(f^n) \leq \overline{K}. \quad (4.46)$$

Demostración. De las proposiciones 4.7 y 4.8 se sabe que

$$\begin{aligned} TV_r(f^{n+1}) &\leq (1 + K\Delta t)TV_r(f^n) + K\Delta t M^{in}, \\ TV_p(f^{n+1}) &\leq (1 + 2K\Delta t)TV_p(f^n) + 2K\Delta t \cdot TV_r(f^n) + K\Delta t M^{in}. \end{aligned}$$

Sumando ambas desigualdades, se puede obtener

$$\begin{aligned} TV(f^{n+1}) &\leq (1 + 2K\Delta t)TV_p(f^n) + (1 + 3K\Delta t)TV_r(f^n) + 2K\Delta tM^{in} \\ &\leq (1 + 3K\Delta t)TV_p(f^n) + (1 + 3K\Delta t)TV_r(f^n) + 3K\Delta tM^{in} \\ &= (1 + 3K\Delta t)TV(f^n) + 3K\Delta tM^{in}. \end{aligned}$$

Si se suma M^{in} en ambos lados de dicha desigualdad, se tiene que

$$TV(f^{n+1}) + M^{in} \leq (1 + 3K\Delta t) \{TV(f^n) + M^{in}\}.$$

Como esta última desigualdad se cumple para todo $n \in \mathbb{N}$, se puede afirmar que

$$\begin{aligned} TV(f^n) + M^{in} &\leq (1 + 3K\Delta t)^n \{TV(f^0) + M^{in}\} \\ &\leq e^{3Kn\Delta t} \{TV(f^0) + M^{in}\} \\ &\leq e^{3KT} \{TV(f^0) + M^{in}\}. \end{aligned}$$

Si se resta M^{in} en ambos lados,

$$TV(f^n) \leq e^{3KT}TV(f^0) + (e^{3KT} - 1)M^{in}. \quad (4.47)$$

Sólo falta acotar $TV(f^0)$. Dado que $f^{in} \in W^{1,1}(\mathcal{S}_P)$, se sabe que

$$\begin{aligned} \sum_{j,i} \left\{ \int_{\Lambda_{j,i}} \left| \frac{f^{in}(p, r + \Delta r) - f^{in}(p, r)}{\Delta r} \right| dr dp + \int_{\Lambda_{j,i}} \left| \frac{f^{in}(p + \Delta p, r) - f^{in}(p, r)}{\Delta p} \right| dr dp \right\} \\ \rightarrow \|\partial_r f^{in}\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} + \|\partial_p f^{in}\|_{L^1(\mathcal{S}_P)}, \end{aligned}$$

cuando $|h| \rightarrow 0$, por lo cual existe $\alpha > 0$, independiente de h , tal que

$$\sum_{j,i} \left\{ \int_{\Lambda_{j,i}} \left| \frac{f^{in}(p, r + \Delta r) - f^{in}(p, r)}{\Delta r} \right| dr dp + \int_{\Lambda_{j,i}} \left| \frac{f^{in}(p + \Delta p, r) - f^{in}(p, r)}{\Delta p} \right| dr dp \right\} \leq \alpha.$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} TV(f^0) &= \sum_{j,i} \left\{ \frac{|f_{j,i+1}^0 - f_{j,i}^0|}{\Delta r} \Delta p \Delta r + \frac{|f_{j+1,i}^0 - f_{j,i}^0|}{\Delta p} \Delta p \Delta r \right\} \\ &= \sum_{j,i} \left\{ \left| \int_{\Lambda_{j,i}} \frac{f^{in}(p, r + \Delta r) - f^{in}(p, r)}{\Delta r} dr dp \right| + \left| \int_{\Lambda_{j,i}} \frac{f^{in}(p + \Delta p, r) - f^{in}(p, r)}{\Delta p} dr dp \right| \right\} \\ &\leq \sum_{j,i} \left\{ \int_{\Lambda_{j,i}} \left| \frac{f^{in}(p, r + \Delta r) - f^{in}(p, r)}{\Delta r} \right| dr dp + \int_{\Lambda_{j,i}} \left| \frac{f^{in}(p + \Delta p, r) - f^{in}(p, r)}{\Delta p} \right| dr dp \right\} \end{aligned}$$

$$\leq \alpha,$$

de donde (4.47) resulta en

$$TV(f^n) \leq e^{3KT} \alpha + (e^{3KT} - 1) M^{in},$$

demostrando (4.46). □

Capítulo 5

Convergencia del método

En este capítulo se utilizan las propiedades expuestas previamente para demostrar el teorema 3.1 que garantiza la convergencia del esquema (3.7) a una solución del problema débil (2.8), al menos para una subsucesión. Para ello, se demuestra, en primer lugar, que si $\{(f_h, u_h)\}$ es una sucesión de soluciones del esquema (3.7), entonces existe una subsucesión $(f_h, u_h)_h$ que converge a algún (f, u) . Posteriormente, se prueba que ese mismo par (f, u) es solución del problema débil (2.8).

5.1. Resultados de compacidad

Para garantizar que existe una subsucesión $(f_h, u_h)_h$ convergente, se utiliza el Teorema de Arzelà-Ascoli que relaciona los conceptos de compacidad y equicontinuidad. Este último se expone a continuación, a partir de Definición 1.3.1 de (Vrabie, 1995).

Definición 5.1 (Equicontinuidad). Sea X un espacio de Banach real (con norma $\|\cdot\|_X$). Un subconjunto $\mathcal{K}$ de $\mathcal{C}([a, b]; X)$ es llamado *equicontinuo* si

$$\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0 \text{ tal que } \forall t_1, t_2 \in [a, b], |t_1 - t_2| < \delta \Rightarrow \|f(t_1) - f(t_2)\|_X < \epsilon,$$

uniformemente para todo $f \in \mathcal{K}$.

La forma del teorema de Arzelà-Ascoli que conviene utilizar es la que se encuentra en el Teorema 1.3.1 de (Vrabie, 1995). Así, se trabaja directamente con un espacio de Banach X y un subconjunto de $\mathcal{C}([a, b]; X)$.

Teorema 5.2 (Arzelà-Ascoli). Sea X un espacio de Banach real. Un subconjunto $\mathcal{K}$ de $\mathcal{C}([a, b]; X)$ es relativamente secuencialmente compacto si y sólo si

1. $\mathcal{K}$ es equicontinuo,
2. existe un subconjunto D denso en $[a, b]$ tal que, para cada $t \in D$, la sección transversal de $\mathcal{K}$ en t definida por

$$\mathcal{K}(t) := \{f(t) : f \in \mathcal{K}\}$$

es relativamente compacto en X .

Demostración. Ver Teorema 0.4.11 de (Edwards, 1965). □

Para cada (f_h, u_h) solución del esquema (3.7), se definen las funciones auxiliares $\tilde{f}_h : [0, T) \times \mathcal{S}_P \rightarrow \mathbb{R}$ y $\tilde{u}_h : [0, T) \rightarrow \mathbb{R}$ tales que

$$\begin{aligned} \tilde{f}_h(t, p, r) &:= \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \left[f_{j,i}^n + \frac{t - t_n}{\Delta t} (f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n) \right] \mathbf{1}_{\Lambda_{j,i}}(p, r), \\ \tilde{u}_h(t) &:= u^n + \frac{t - t_n}{\Delta t} (u^{n+1} - u^n), \end{aligned} \quad (5.1)$$

para $t \in [t_n, t_{n+1})$. A estas funciones se les puede aplicar el Teorema de Arzelà-Ascoli, luego de probar equicontinuidad.

Proposición 5.3. *Los conjuntos $\{\tilde{f}_h\}$ y $\{\tilde{u}_h\}$ son equicontinuos.*

Demostración. Sean $s_1, s_2 \in [0, T)$, con $s_1 < s_2$, y sean $n_1, n_2 \in \mathbb{N}$, con $n_1 < n_2$, tales que

$$t_{n_1-1} < s_1 < t_{n_1}, \quad t_{n_2} < s_2 < t_{n_2+1}.$$

Entonces, utilizando desigualdad triangular,

$$\begin{aligned} \|\tilde{f}_h(s_1, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(s_2, \cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} &\leq \|\tilde{f}_h(s_1, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(t_{n_1}, \cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} \\ &\quad + \sum_{n=n_1}^{n_2-1} \|\tilde{f}_h(t_n, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(t_{n+1}, \cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} \\ &\quad + \|\tilde{f}_h(t_{n_2}, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(s_2, \cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Por un lado, como el segundo término del lado derecho está evaluado en valores de t donde $\tilde{f}_h = f_h$, éste satisface

$$\begin{aligned} \sum_{n=n_1}^{n_2-1} \|\tilde{f}_h(t_n, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(t_{n+1}, \cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} &= \sum_{n=n_1}^{n_2-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I |f_{j,i}^n - f_{j,i}^{n+1}| \Delta p \Delta r \\ &\leq \sum_{n=n_1}^{n_2-1} C \Delta t \end{aligned}$$

$$= C(t_{n_2} - t_{n_1}), \quad (5.3)$$

donde la desigualdad la asegura (4.12). Por otro lado,

$$\begin{aligned} \|\tilde{f}_h(s_1, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(t_{n_1}, \cdot, \cdot)\|_{L^1(S_P)} &= \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \left| f_{j,i}^{n_1-1} + \frac{s_1 - t_{n_1-1}}{\Delta t} (f_{j,i}^{n_1} - f_{j,i}^{n_1-1}) - f_{j,i}^{n_1} \right| \Delta p \Delta r \\ &= \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \left| \frac{s_1 - t_{n_1}}{\Delta t} (f_{j,i}^{n_1} - f_{j,i}^{n_1-1}) \right| \Delta p \Delta r \\ &\leq C(t_{n_1} - s_1). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Análogamente, se demuestra que

$$\|\tilde{f}_h(t_{n_2}, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(s_2, \cdot, \cdot)\|_{L^1(S_P)} \leq C(s_2 - t_{n_2}). \quad (5.5)$$

Luego, de (5.3), (5.4) y (5.5), se tiene para (5.2)

$$\|\tilde{f}_h(s_1, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(s_2, \cdot, \cdot)\|_{L^1(S_P)} \leq C(s_2 - s_1).$$

Por lo tanto, si $s_1, s_2 \in [0, T)$ son arbitrarios, se satisface

$$\|\tilde{f}_h(s_1, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(s_2, \cdot, \cdot)\|_{L^1(S_P)} \leq C|s_1 - s_2|, \quad (5.6)$$

es decir, $\{\tilde{f}_h\}$ es equicontinuo.

De manera similar, si $s_1, s_2 \in [0, T)$ con $s_1 < s_2$, como al inicio de esta demostración,

$$\begin{aligned} |\tilde{u}_h(s_1) - \tilde{u}_h(s_2)| &\leq |\tilde{u}_h(s_1) - \tilde{u}_h(t_{n_1})| + \sum_{n=n_1}^{n_2-1} |\tilde{u}_h(t_n) - \tilde{u}_h(t_{n+1})| + |\tilde{u}_h(t_{n_2}) - \tilde{u}_h(s_2)| \\ &= \left| \frac{s_1 - t_{n_1}}{\Delta t} (u^{n_1} - u^{n_1-1}) \right| + \sum_{n=n_1}^{n_2-1} |u^n - u^{n+1}| + \left| \frac{s_2 - t_{n_2}}{\Delta t} (u^{n_2+1} - u^{n_2}) \right| \\ &\leq C(t_{n_1} - s_1) + \sum_{n=n_1}^{n_2-1} C\Delta t + C(s_2 - t_{n_2}) \\ &= C(s_2 - s_1), \end{aligned} \quad (5.7)$$

donde las desigualdades son consecuencias de la desigualdad triangular y de (4.4). Luego, para cualquier par $s_1, s_2 \in [0, T)$ arbitrarios,

$$|\tilde{u}_h(s_1) - \tilde{u}_h(s_2)| \leq C|s_1 - s_2|,$$

es decir, $\{\tilde{u}_h\}$ es equicontinuo. □

Proposición 5.4. *Existe una subsucesión $(f_h, u_h)_h$ y funciones $f \in \mathcal{C}([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P))$ y $u \in C([0, T])$ tales que*

$$\begin{aligned} f_h &\rightarrow f \text{ en } L^\infty([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P)) \\ u_h &\rightarrow u \text{ en } L^\infty([0, T]) \end{aligned}$$

Demostración. Es evidente que $\tilde{f}_h \in \mathcal{C}([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P))$.

Utilizando la definición de $\tilde{f}_h$ junto a (4.12), se puede obtener

$$\begin{aligned} \sup_{[0, T]} \|f_h(t, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(t, \cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} &\leq \sup_{n \in \{0, \dots, N-2\}} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I |f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n| \Delta p \Delta r \\ &\leq C \Delta t. \end{aligned} \tag{5.8}$$

Por otro lado, del lema 4.9 se sabe que $TV(\tilde{f}_h(t, \cdot, \cdot)) < \overline{K}$, para todo $t \in [0, T]$. Por Corolario 5.3.4 de (Ziemer, 1989), el conjunto $\{f \in L^1(\mathcal{S}_P) : TV(f) < \overline{K}\}$ es compacto en $L^1(\mathcal{S}_P)$, por lo cual $\{\tilde{f}_h(t, \cdot, \cdot)\}$ es relativamente compacto en $L^1(\mathcal{S}_P)$, para cada $t \in [0, T]$.

Lo anterior corresponde a la condición 2 del teorema 5.2 (Arzelà-Ascoli). Como además se sabe que $\{\tilde{f}_h\}$ es equicontinuo, se cumplen ambas condiciones para aplicar dicho teorema y así afirmar que $\{\tilde{f}_h\}$ es relativamente secuencialmente compacto. Luego, existe una subsucesión $(\tilde{f}_h)_h$ y una función $f \in \mathcal{C}([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P))$ tales que

$$\tilde{f}_h \rightarrow f \text{ en } \mathcal{C}([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P)), \tag{5.9}$$

cuando $|h| \rightarrow 0$.

Por lo tanto, por desigualdad triangular, se tiene para la subsucesión $(f_h)_h$ mencionada

$$\begin{aligned} \sup_{[0, T]} \|f_h(t, \cdot, \cdot) - f(t, \cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} &\leq \sup_{[0, T]} \|f_h(t, \cdot, \cdot) - \tilde{f}_h(t, \cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} \\ &\quad + \sup_{[0, T]} \|\tilde{f}_h(t, \cdot, \cdot) - f(t, \cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)}, \end{aligned}$$

donde, si se utilizan (5.8) y (5.9), ambos términos del lado derecho tienden a 0 cuando $|h| \rightarrow 0$. Por proposición 4.1, $f_h \in L^\infty([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P))$, por lo cual lo recientemente obtenido permite afirmar que existe una subsucesión $(f_h)_h$ tal que

$$f_h \rightarrow f \text{ en } L^\infty([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P)), \tag{5.10}$$

cuando $|h| \rightarrow 0$, con $f \in \mathcal{C}([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P))$.

De manera similar, se sabe que $\tilde{u}_h \in \mathcal{C}([0, T])$. La proposición 4.3 permite saber que $\{\tilde{u}_h(t)\} \subset [0, \rho]$ para cualquier $t \in [0, T]$, por lo cual $\{\tilde{u}_h(t)\}$ es relativamente compacto en

$\mathbb{R}$, para todo $t \in [0, T)$. Además, la proposición 5.3 asegura la equicontinuidad de $\{\tilde{u}_h\}$, por lo cual el teorema 5.2 garantiza que $\{\tilde{u}_h\}$ es relativamente secuencialmente compacto. Luego, existe una subsucesión $(\tilde{u}_h)_h$ y $u \in \mathcal{C}([0, T))$ tales que

$$\tilde{u}_h \rightarrow u \text{ en } \mathcal{C}([0, T)), \quad (5.11)$$

cuando $|h| \rightarrow 0$. Además, de la definición de $\tilde{u}_h$ y de (4.4),

$$\sup_{t \in [0, T)} |u_h(t) - \tilde{u}_h(t)| \leq \sup_{n \in \{0, \dots, N-2\}} |u^{n+1} - u^n| \leq C\Delta t. \quad (5.12)$$

Utilizando (5.11) y (5.12),

$$\sup_{[0, T)} |u_h(t) - u(t)| \leq \sup_{[0, T)} |u_h(t) - \tilde{u}_h(t)| + \sup_{[0, T)} |\tilde{u}_h(t) - u(t)| \rightarrow 0,$$

cuando $|h| \rightarrow 0$, para una subsucesión $(u_h)_h$. Por lo tanto, existe una subsucesión $(u_h)_h$ tal que

$$u_h \rightarrow u \text{ en } L^\infty([0, T)) \quad (5.13)$$

cuando $|h| \rightarrow 0$, con $u \in \mathcal{C}([0, T); L^1(\mathcal{S}_P))$. $\square$

5.2. Demostración de la convergencia

En la sección 5.1 se demuestra que el esquema numérico converge a un elemento. Sin embargo, es necesario demostrar que ese mismo elemento es solución exacta del problema débil (2.8). De esto se encarga la siguiente proposición.

Proposición 5.5. *El par de funciones (f, u) dados por (5.10) y (5.13) en la proposición 5.4 satisface la formulación débil (2.8).*

Demostración. En esta demostración se supone que los valores de h son aquellos correspondientes a la subsucesión convergente presentada en la proposición 5.4. Por lo tanto, si por ejemplo se menciona un límite cuando $|h| \rightarrow 0$, se refiere sólo a aquella subsucesión aunque no se exprese de forma explícita.

Utilizando la expresión entregada por el esquema numérico (3.7), se puede escribir

$$\begin{aligned} f_{j,i}^{n+1} &= f_{j,i}^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} (f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n) + \frac{\Delta t}{\Delta r} \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} (f_{j,i-1}^n - f_{j,i}^n) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta r} (\mathcal{V}_{j,i-1/2}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n) f_{j,i}^n. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Sea $\varphi \in \mathcal{C}_c^1([0, T) \times \mathcal{S}_P)$. Se definen

$$\begin{aligned}\varphi_{j,i}^n &:= \frac{1}{\Delta t \Delta r \Delta p} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Lambda_{j,i}} \varphi(t, p, r) dr dp dt, \\ Y_1^h &:= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \Delta r (f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n) \varphi_{j,i}^n \Delta p, \\ Y_2^h &:= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \Delta t \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} (f_{j,i+1}^{n+1} - f_{j,i}^n) \varphi_{j,i}^n \Delta p \\ &\quad + \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \Delta t \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} (f_{j,i-1}^{n+1} - f_{j,i}^n) \varphi_{j,i}^n \Delta p \\ &\quad + \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \Delta t (\mathcal{V}_{j,i-1/2}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n) f_{j,i}^n \varphi_{j,i}^n \Delta p.\end{aligned}$$

De (5.14) se puede observar claramente que

$$Y_1^h = Y_2^h.$$

Por otro lado, se definen

$$\begin{aligned}Z_1^h &:= - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f_h(t, p, r) \partial_t \varphi(t, p, r) dr dp dt - \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp, \\ Z_2^h &:= - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} \partial_r \tilde{\mathcal{V}}(u_h(t), p, r) f_h(t, p, r) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\ &\quad + \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f_h(t, p, r) \partial_r (\tilde{\mathcal{V}}(u_h(t), p, r) \varphi(t, p, r)) dr dp dt,\end{aligned}$$

donde

$$\tilde{\mathcal{V}}(u(t), p, r) := \mathcal{V}(u(t), p, r_{i-1/2}) + \frac{r - r_{i-1/2}}{\Delta r} (\mathcal{V}(u(t), p, r_{i+1/2}) - \mathcal{V}(u(t), p, r_{i-1/2})),$$

para $r \in [r_{i-1/2}, r_{i+1/2})$. Observar que $\tilde{\mathcal{V}}$ es la función lineal a trozos en la variable r tal que

$$\tilde{\mathcal{V}}(u(t), p, r_{i+1/2}) = \mathcal{V}(u(t), p, r_{i+1/2}),$$

para $i \in \{-1, 0, 1, \dots, I\}$, por lo cual se sabe que $\tilde{\mathcal{V}} \rightarrow \mathcal{V}$, cuando $|h| \rightarrow 0$.

Las proposiciones 4.3 y 4.11 que aseguran la estabilidad L^∞ de u_h y f_h , respectivamente, permiten saber que u_h y f_h poseen cotas uniformes. Además, $\tilde{\mathcal{V}}$ es acotada debido a que $\mathcal{V}$ lo es. Esto permite utilizar la proposición 5.4 y el Teorema de la Convergencia Dominada para obtener

$$\lim_{|h| \rightarrow 0} Z_1^h = - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f(t, p, r) \partial_t \varphi(t, p, r) dr dp dt - \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp,$$

$$\begin{aligned} \lim_{|h| \rightarrow 0} Z_2^h &= - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} \partial_r \mathcal{V}(u(t), p, r) f(t, p, r) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\ &\quad + \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f(t, p, r) \partial_r (\mathcal{V}(u(t), p, r) \varphi(t, p, r)) dr dp dt. \end{aligned}$$

Si se restan ambos límites, se tiene una expresión similar a la ecuación (2.8a) del problema débil, por lo cual se debe seguir desarrollando para llegar a una expresión que sea exactamente igual a dicha ecuación.

Por un lado,

$$\begin{aligned} Z_1^h &= - \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\mathcal{S}_P} f_h(t_n, p, r) [\varphi(t_{n+1}, p, r) - \varphi(t_n, p, r)] dr dp - \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp \\ &= \sum_{n=0}^{N-2} \int_{\mathcal{S}_P} (f_h(t_{n+1}, p, r) - f_h(t_n, p, r)) \varphi(t_{n+1}, p, r) dr dp \\ &\quad + \int_{\mathcal{S}_P} (f_h(0, p, r) - f^{in}(p, r)) \varphi(0, p, r) dr dp. \end{aligned}$$

Luego,

$$\begin{aligned} Z_1^h - Y_1^h &= \sum_{n=0}^{N-2} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I (f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n) \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Lambda_{j,i}} \frac{\varphi(t_{n+1}, p, r) - \varphi(t, p, r)}{\Delta t} dr dp dt \\ &\quad + \int_{\mathcal{S}_P} (f_h(0, p, r) - f^{in}(p, r)) \varphi(0, p, r) dr dp, \end{aligned}$$

de donde

$$\begin{aligned} |Z_1^h - Y_1^h| &\leq \sum_{n=0}^{N-2} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I |f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n| \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Lambda_{j,i}} |\partial_t \varphi| dr dp dt \\ &\quad + \|f_h(0, \cdot, \cdot) - f^{in}(\cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} \|\varphi\|_{L^\infty([0, T] \times \mathcal{S}_P)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \sum_{n=0}^{N-2} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I |f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n| \Delta t \Delta p \Delta r \|\partial_t \varphi\|_{L^\infty([0,T) \times \mathcal{S}_P)} \\
&\quad + \|f_h(0, \cdot, \cdot) - f^{in}(\cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} \|\varphi\|_{L^\infty([0,T) \times \mathcal{S}_P)} \\
&\leq T \|\partial_t \varphi\|_{L^\infty([0,T) \times \mathcal{S}_P)} \sup_{0 \leq n \leq N-2} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I |f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n| \Delta p \Delta r \\
&\quad + \|f_h(0, \cdot, \cdot) - f^{in}(\cdot, \cdot)\|_{L^1(\mathcal{S}_P)} \|\varphi\|_{L^\infty([0,T) \times \mathcal{S}_P)},
\end{aligned}$$

y de (4.12),

$$|Z_1^h - Y_1^h| \leq C(\varphi) \Delta t. \quad (5.15)$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}
Z_2^h &= - \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \frac{1}{\Delta r} (\mathcal{V}_{j,i+1/2}^n - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^n) f_{j,i}^n \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Lambda_{j,i}} \varphi(t, p, r) dr dp dt \\
&\quad + \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I f_{j,i}^n \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{p_{j-1/2}}^{p_{j+1/2}} (\mathcal{V}_{j,i+1/2}^n \varphi(t, p, r_{i+1/2}) - \mathcal{V}_{j,i-1/2}^n \varphi(t, p, r_{i-1/2})) dp dt \\
&= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \frac{1}{\Delta r} (\mathcal{V}_{j,i-1/2}^n - \mathcal{V}_{j,i+1/2}^n) f_{j,i}^n \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Lambda_{j,i}} \varphi(t, p, r) dr dp dt \\
&\quad + \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} (f_{j,i-1}^n - f_{j,i}^n) \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{p_{j-1/2}}^{p_{j+1/2}} \varphi(t, p, r_{i-1/2}) dp dt \\
&\quad + \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} (f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n) \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{p_{j-1/2}}^{p_{j+1/2}} \varphi(t, p, r_{i+1/2}) dp dt,
\end{aligned}$$

de donde

$$\begin{aligned}
Z_2^h - Y_2^h &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} (f_{j,i-1}^n - f_{j,i}^n) \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Lambda_{j,i}} \frac{\varphi(t, p, r_{i-1/2}) - \varphi(t, p, r)}{\Delta r} dr dp dt \\
&\quad + \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} (f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n) \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Lambda_{j,i}} \frac{\varphi(t, p, r_{i+1/2}) - \varphi(t, p, r)}{\Delta r} dr dp dt.
\end{aligned}$$

Luego

$$|Z_2^h - Y_2^h| \leq \Delta t \Delta p \Delta r \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \mathcal{V}_{j,i-1/2}^{n+} |f_{j,i-1}^n - f_{j,i}^n| \|\partial_r \varphi\|_{L^\infty([0,T) \times \mathcal{S}_P)}$$

$$\begin{aligned}
& + \Delta t \Delta p \Delta r \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I \mathcal{V}_{j,i+1/2}^{n-} |f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n| \|\partial_r \varphi\|_{L^\infty([0,T] \times \mathcal{S}_P)} \\
& \leq 2T \Delta r \|\partial_r \varphi\|_{L^\infty([0,T] \times \mathcal{S}_P)} \|\mathcal{V}\|_{L^\infty([0,T] \times \mathcal{S}_P)} \sup_{0 \leq n \leq N-1} \sum_{j=0}^J \sum_{i=-1}^I |f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n| \Delta p,
\end{aligned}$$

y recordando que

$$\sum_{j=0}^J \sum_{i=-1}^I |f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n| \Delta p = \sum_{j=0}^J \sum_{i=-1}^I |g_{j,i+1/2}| \Delta p \Delta r = TV_r(f^n) \leq TV(f^n) \leq \bar{K},$$

cuya última desigualdad se sabe del lema 4.9, se tiene

$$|Z_2^h - Y_2^h| \leq C(\varphi) \Delta r. \quad (5.16)$$

Como $Y_1^h = Y_2^h$, de (5.15) y (5.16)

$$|Z_1^h - Z_2^h| \leq |Z_1^h - Y_1^h| + |Z_2^h - Y_2^h| \leq C(\varphi)(\Delta t + \Delta r),$$

por lo cual $Z_1^h - Z_2^h \rightarrow 0$ cuando $|h| \rightarrow 0$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned}
0 &= \lim_{|h| \rightarrow 0} Z_1^h - \lim_{|h| \rightarrow 0} Z_2^h \\
&= - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f(t, p, r) \partial_t \varphi(t, p, r) dr dp dt - \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp \\
&\quad + \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} \partial_r \mathcal{V}(u(t), p, r) f(t, p, r) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\
&\quad - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f(t, p, r) \partial_r (\mathcal{V}(u(t), p, r) \varphi(t, p, r)) dr dp dt.
\end{aligned} \quad (5.17)$$

El resultado (5.17) es parecido a la ecuación (2.8a) del problema débil. La diferencia está en las derivadas, las cuales no se pueden modificar con tanta facilidad debido a que no está asegurada la regularidad de f . Por este motivo, se utilizan molificadores.

Sea η el molificador estándar dado por

$$\eta(x) := \begin{cases} c \cdot e^{\frac{1}{|x|^{2-1}}} & , \quad |x| < 1 \\ 0 & , \quad |x| \geq 1 \end{cases},$$

para $x \in \mathbb{R}$, donde c es tal que

$$\int_{\mathbb{R}} \eta(x) dx = 1.$$

Sea

$$\eta_\epsilon(x) := \frac{1}{\epsilon} \eta\left(\frac{x}{\epsilon}\right).$$

Para una función $w : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ localmente integrable, se define la *molificación* de w , con parámetro ϵ , por

$$w^\epsilon(x) := (w * \eta_\epsilon)(x) = \int_a^b \eta_\epsilon(x - y) w(y) dy,$$

para $x \in (a + \epsilon, b - \epsilon)$. En la sección C.4 de (Evans, 2010) se demuestra que w^ϵ es suave en $(a + \epsilon, b - \epsilon)$ para cualquier $\epsilon > 0$, sin importar la forma de w , y además $w^\epsilon \rightarrow w$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Estas definiciones se deben aplicar a la función $f(t, p, \cdot)$, con t y p fijos, por lo cual se define

$$f^\epsilon(t, p, r) = \int_0^1 \eta_\epsilon(r - y) f(t, p, y) dy,$$

para $(t, p, r) \in [0, T) \times \mathcal{S}_P(\epsilon)$, con

$$\mathcal{S}_P(\epsilon) := [0, P] \times [\epsilon, 1 - \epsilon].$$

Así, esta función es suave para la variable r , en $(\epsilon, 1 - \epsilon)$.

Para una función $g \in L^\infty([0, T]; L^1(\mathcal{S}_P))$, se define el operador

$$\begin{aligned} L(g) := & - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} g(t, p, r) \partial_t \varphi(t, p, r) dr dp dt - \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp \\ & + \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} \partial_r \mathcal{V}(u(t), p, r) g(t, p, r) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\ & - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} g(t, p, r) \partial_r (\mathcal{V}(u(t), p, r) \varphi(t, p, r)) dr dp dt. \end{aligned}$$

Por los resultados de molificadores ya mencionados y utilizando el Teorema de Convergencia Dominada,

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} L(f^\epsilon) = & - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f(t, p, r) \partial_t \varphi(t, p, r) dr dp dt - \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp \\ & + \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} \partial_r \mathcal{V}(u(t), p, r) f(t, p, r) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\ & - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f(t, p, r) \partial_r (\mathcal{V}(u(t), p, r) \varphi(t, p, r)) dr dp dt, \end{aligned}$$

y por (5.17), de lo anterior se tiene que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} L(f^\epsilon) = 0. \tag{5.18}$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} L(f^\epsilon) &:= - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} f^\epsilon(t, p, r) \partial_t \varphi(t, p, r) dr dp dt - \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp \\ &\quad + \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} \partial_r \mathcal{V}(u(t), p, r) f^\epsilon(t, p, r) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\ &\quad - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} f^\epsilon(t, p, r) \partial_r (\mathcal{V}(u(t), p, r) \varphi(t, p, r)) dr dp dt. \end{aligned}$$

Se aprovecha la suavidad de f^ϵ para escribir los dos últimos términos en la forma

$$\begin{aligned} &\int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} \partial_r \mathcal{V}(u(t), p, r) f^\epsilon(t, p, r) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\ &\quad - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} f^\epsilon(t, p, r) \partial_r (\mathcal{V}(u(t), p, r) \varphi(t, p, r)) dr dp dt \\ &= \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} \partial_r \mathcal{V}(u(t), p, r) f^\epsilon(t, p, r) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\ &\quad + \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} \partial_r f^\epsilon(t, p, r) \mathcal{V}(u(t), p, r) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\ &\quad - \int_0^T \int_0^P [f^\epsilon(t, p, r) \mathcal{V}(u(t), p, r) \varphi(t, p, r)]_{r=\epsilon}^{r=1-\epsilon} dp dt \\ &= \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} \partial_r (\mathcal{V}(u(t), p, r) f^\epsilon(t, p, r)) \varphi(t, p, r) dr dp dt \\ &\quad - \int_0^T \int_0^P [f^\epsilon(t, p, r) \mathcal{V}(u(t), p, r) \varphi(t, p, r)]_{r=\epsilon}^{r=1-\epsilon} dp dt \\ &= - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} \mathcal{V}(t, p, r) f^\epsilon(t, p, r) \partial_r \varphi(t, p, r) dr dp dt. \end{aligned}$$

de donde

$$\begin{aligned} L(f^\epsilon) &= - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} f^\epsilon(t, p, r) \partial_t \varphi(t, p, r) dr dp dt - \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp \\ &\quad - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P(\epsilon)} \mathcal{V}(t, p, r) f^\epsilon(t, p, r) \partial_r \varphi(t, p, r) dr dp dt, \end{aligned}$$

Se utiliza nuevamente el Teorema de la Convergencia Dominada para obtener

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} L(f^\epsilon) = - \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f(t, p, r) \partial_t \varphi(t, p, r) dr dp dt - \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp \quad (5.19)$$

$$- \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} \mathcal{V}(t, p, r) f(t, p, r) \partial_r \varphi(t, p, r) dr dp dt. \quad (5.20)$$

Luego, de (5.18) y (5.19), se obtiene

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} f(t, p, r) \partial_t \varphi(t, p, r) dr dp dt + \int_{\mathcal{S}_P} f^{in}(p, r) \varphi(0, p, r) dr dp \\ + \int_0^T \int_{\mathcal{S}_P} \mathcal{V}(t, p, r) f(t, p, r) \partial_r \varphi(t, p, r) dr dp dt = 0. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Por último, del esquema (3.7), se sabe que

$$u^n = \rho - \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j f_{j,i}^n \Delta r \Delta p.$$

Si se define

$$I_h(p, r) = \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j \mathbf{1}_{\Lambda_{j,i}}(p, r),$$

se observa que $I_h \rightarrow pr$ cuando $|h| \rightarrow 0$. Así, el esquema permite escribir

$$u_h(t) = \rho - \int_{\mathcal{S}_P} I_h(p, r) f_h(t, p, r) dr dp,$$

lo cual, si $|h| \rightarrow 0$,

$$u(t) = \rho - \int_{\mathcal{S}_P} r p f(t, p, r) dr dp, \quad (5.22)$$

debido a la proposición 5.4.

Las afirmaciones (5.21) y (5.22) indican que (f, u) de la proposición 5.4 es solución del problema débil (2.8). $\square$

Observación 5.6. La demostración del teorema 3.1 asegura la existencia de una subsucesión de $\{(f_h, u_h)\}$ que converge a un (f, u) que es solución del problema débil, lo cual garantiza la existencia de solución del problema. Sin embargo, en este documento no se demuestra la unicidad de dicha solución.

Capítulo 6

Resultados

En este capítulo se muestran algunos ensayos numéricos, incluyendo sus respectivos parámetros, gráficos y observaciones. Para resolver, se utilizaron rutinas desarrolladas por el autor en lenguaje Fortran 90. Las imágenes fueron obtenidas a través de los software ParaView 5.4.0 y MATLAB R2017a (9.2.0.538062).

En los ejemplos expuestos se garantiza el cumplimiento de las condiciones de estabilidad (3.10) y (3.11). Para ello, se procede como se describe a continuación.

Recordar que las condiciones de estabilidad están dadas por

$$2\frac{\Delta t}{\Delta r}\|\mathcal{V}\|_{L^\infty((0,\rho)\times\mathcal{S}_P)} < 1, \quad \tilde{K}PM^{in}\Delta t < 1,$$

las cuales se pueden escribir en la forma

$$\Delta t < \frac{\Delta r}{2\|\mathcal{V}\|_{L^\infty}}, \quad \Delta t < \frac{1}{\tilde{K}PM^{in}}.$$

Si τ es el valor de Δt propuesto inicialmente, lo anterior sugiere que, al momento de implementar el esquema, un valor correcto para Δt sería

$$\Delta t = \min \left\{ \tau, \frac{\Delta r}{2\|\mathcal{V}\|_{L^\infty}}, \frac{1}{\tilde{K}PM^{in}} \right\}. \quad (6.1)$$

Así, una vez sugerido el valor $\Delta t = \tau$, éste se modifica si no satisface las condiciones de estabilidad.

Con el fin de proponer una forma discreta de (6.1), se reemplaza $\|\mathcal{V}\|_{L^\infty}$ por

$$V^* := \sup_{\substack{u \in [0,\rho] \\ j \in \{0,\dots,J\} \\ i \in \{0,\dots,I\}}} |\mathcal{V}(u, p_j, r_i)| = \max_{\substack{j \in \{0,\dots,J\} \\ i \in \{0,\dots,I\}}} \max_{u \in [0,\rho]} \{|k(p_j, r_i)u - l(p_j, r_i)|\}.$$

Observar que, si p_j y r_i están fijos y sólo u es variable, los máximos de $|k(p_j, r_i)u - l(p_j, r_i)|$ en $[0, \rho]$ se encuentran en los extremos $u = 0$ y $u = \rho$, por lo cual

$$V^* = \max_{j,i} \max \{|k(p_j, r_i)\rho - l(p_j, r_i)|, l(p_j, r_i)\}.$$

Además, se reemplaza $\tilde{K}$ por

$$K^* := \max_{j,i} k(p_j, r_i).$$

Luego, el valor para Δt con el cual se resuelve el esquema de forma computacional resulta en

$$\Delta t = \min \left\{ \tau, \frac{\Delta r}{2V^*}, \frac{1}{K^* P M_{0,h}^0} \right\}.$$

Para todos los ejemplos que se muestran a continuación, el espacio $\mathcal{S}_P$ se ha discretizado bajo los parámetros

$$J = 500,$$

$$I = 500.$$

Además, en cada caso se propone $\tau = 0,001$.

Se utiliza la notación

$$u^\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} u_h(t).$$

Para efectos prácticos, se calcula $u^\infty \approx u_h(T)$, pues en cada ejemplo se tiene que u_h se estabiliza en el tiempo con valores muy cercanos a su respectiva asíntota.

6.1. Ejemplo 1

Siguiendo el ejemplo de (Hingant y Sepúlveda, 2015), para $P = 1$ y $T = 8,01$, se utilizan las tasas de adsorción y desorción

$$k(p, r) = 4p(1 - r), \quad l(p, r) = r,$$

con distribución inicial

$$f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p).$$

Los parámetros utilizados son

$$u^{in} = 0,9$$

$$\rho = 1,$$

y m es tal que

$$u^{in} + \int_0^P \int_0^1 r p f^{in}(p, r) dr dp = \rho.$$

Se calculó que $\Delta t \approx 2,4975 \times 10^{-4}$.

Las figuras 6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5, 6.6, 6.7, 6.8, 6.9 y 6.10 muestran a f_h para distintos tiempos y la figura 6.11 muestra a u_h .

Observar que u_h se estabiliza a través del tiempo y los valores de f_h disminuyen en todo $\mathcal{S}_P$ a medida que el tiempo avanza, salvo en una curva donde aumenta de forma aparentemente indefinida. Dicha curva corresponde a los puntos $(p, r) \in \mathcal{S}_P$ tales que $\mathcal{V}(u^\infty, p, r) = 0$, como se puede apreciar si se compara con el gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ en la figura 6.48.

Esto se interpreta como una tendencia al estado de equilibrio en el fenómeno de sorción: dado un conjunto de polímeros de tamaño p , todos ellos logran tener la misma proporción de grupos funcionales ocupados r y ocurre justamente cuando los iones se acoplan y se sueltan de ellos a la misma rapidez, es decir, cuando $\mathcal{V}(u^\infty, p, r) = 0$. Esta tendencia al equilibrio provoca que los iones libres se mantengan en una cantidad constante u^∞ a medida que el tiempo avanza, tal como muestra la figura 6.11.

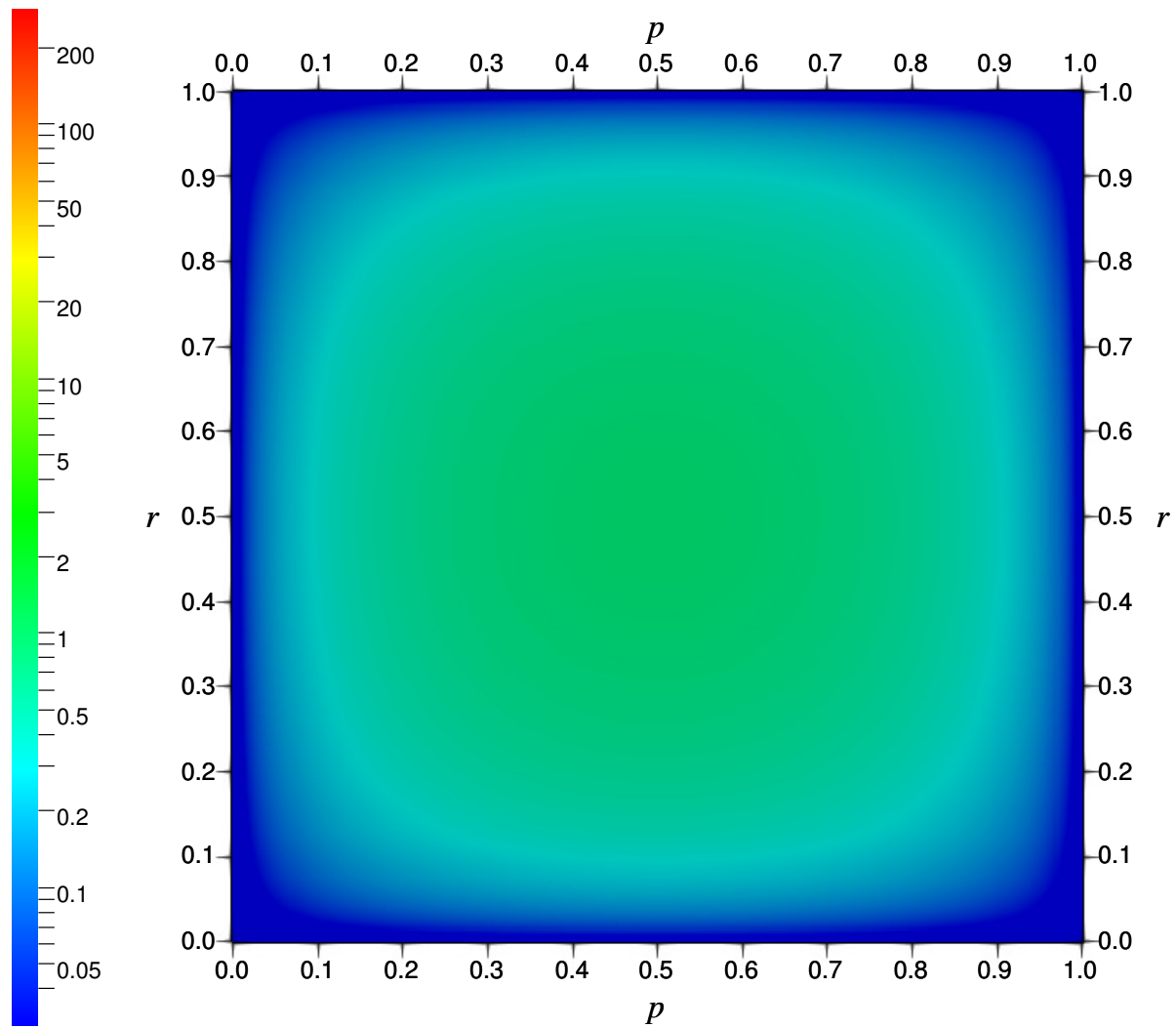


Figura 6.1: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t=0; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1-r)$ y $l(p, r) = r$.

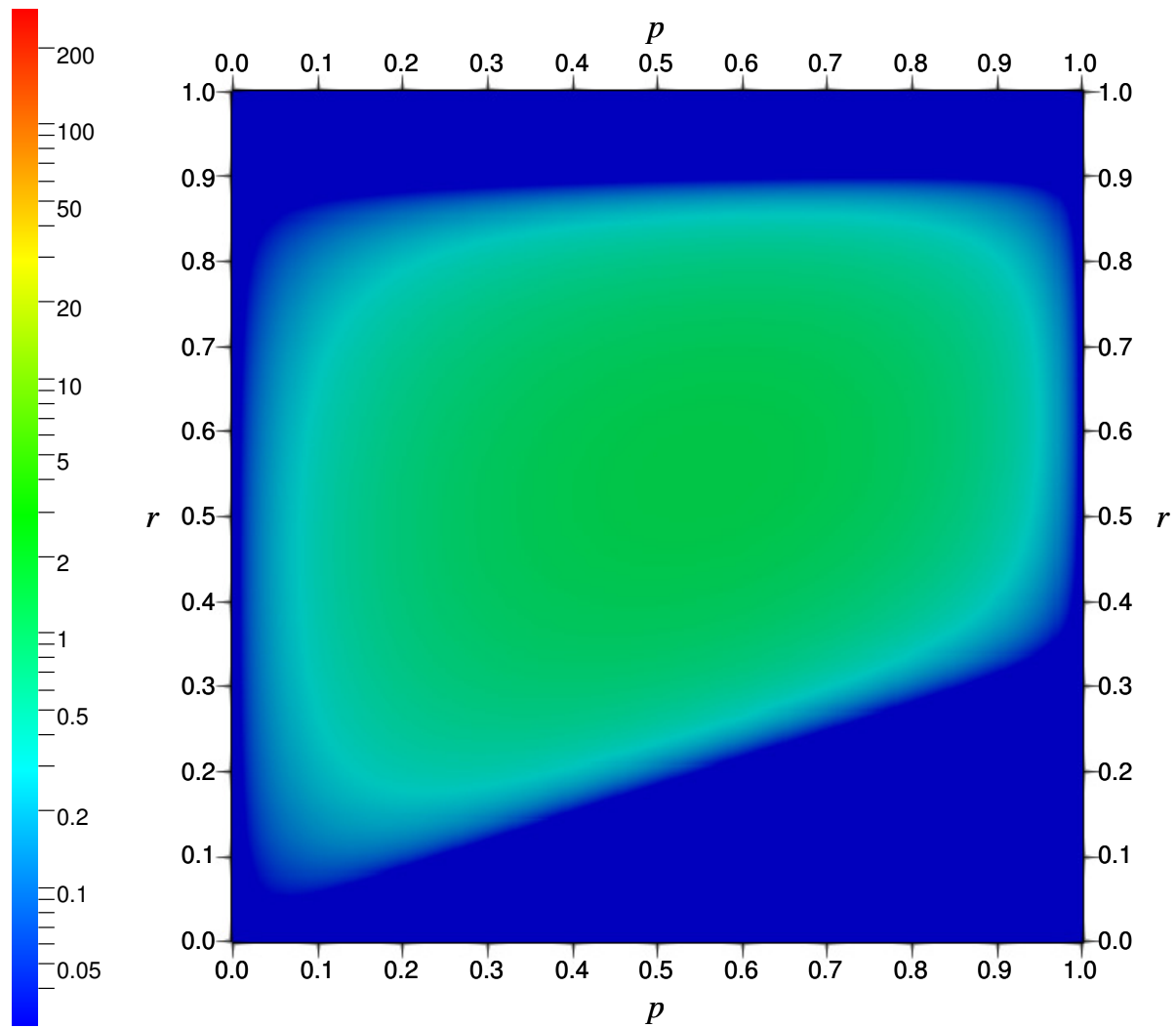


Figura 6.2: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 0,125; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

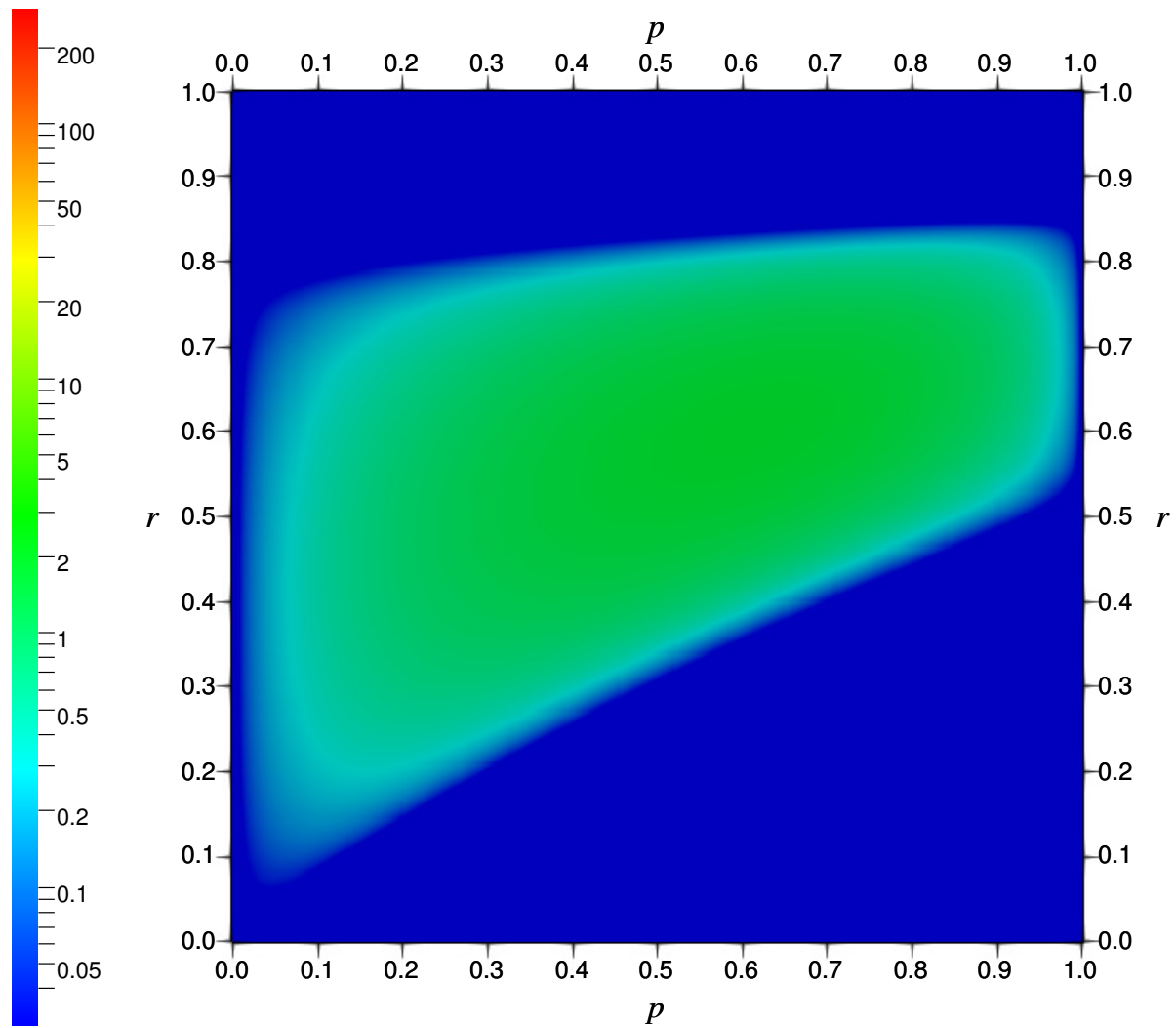


Figura 6.3: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 0,25; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

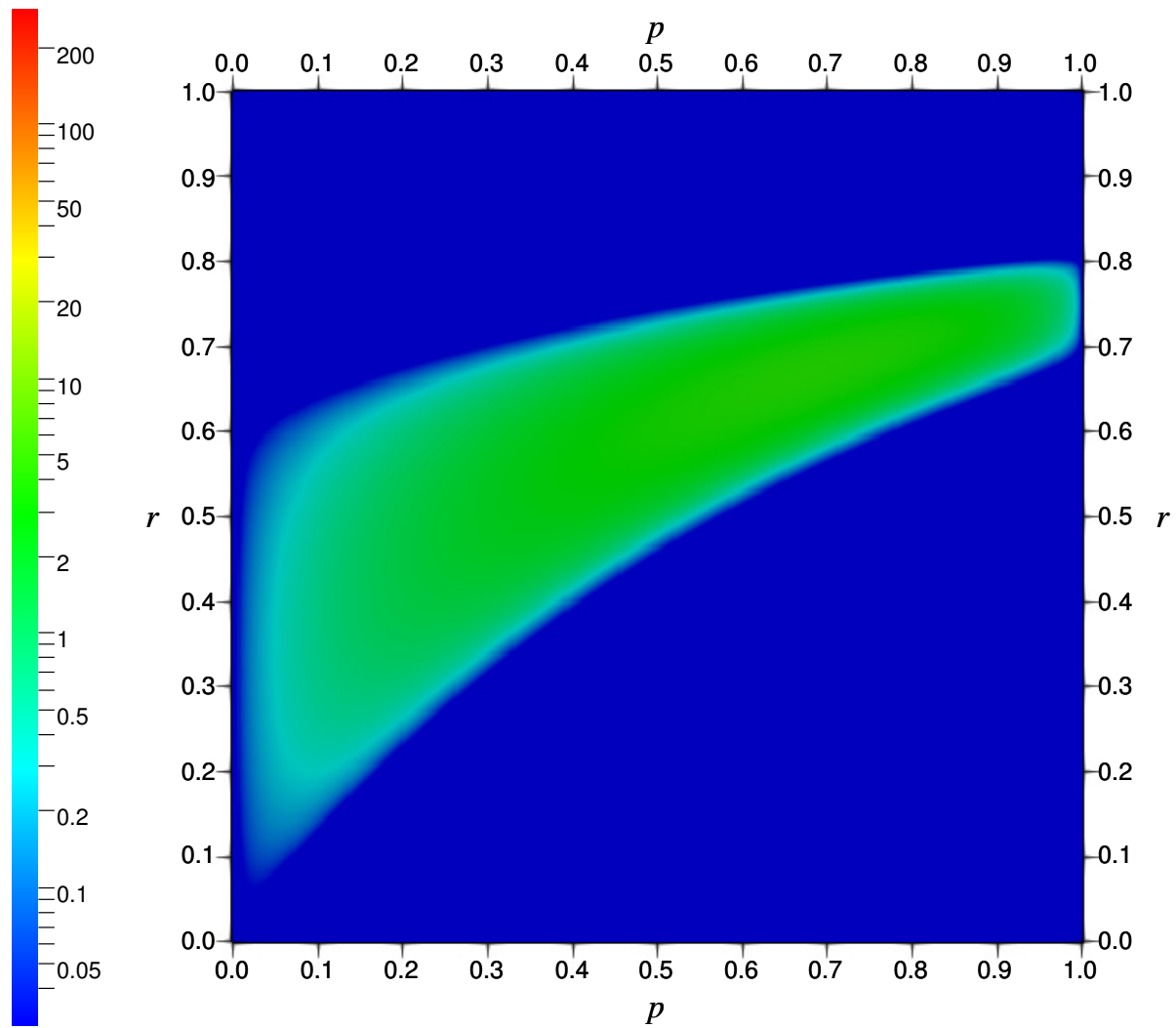


Figura 6.4: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 0,5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1-r)$ y $l(p, r) = r$.

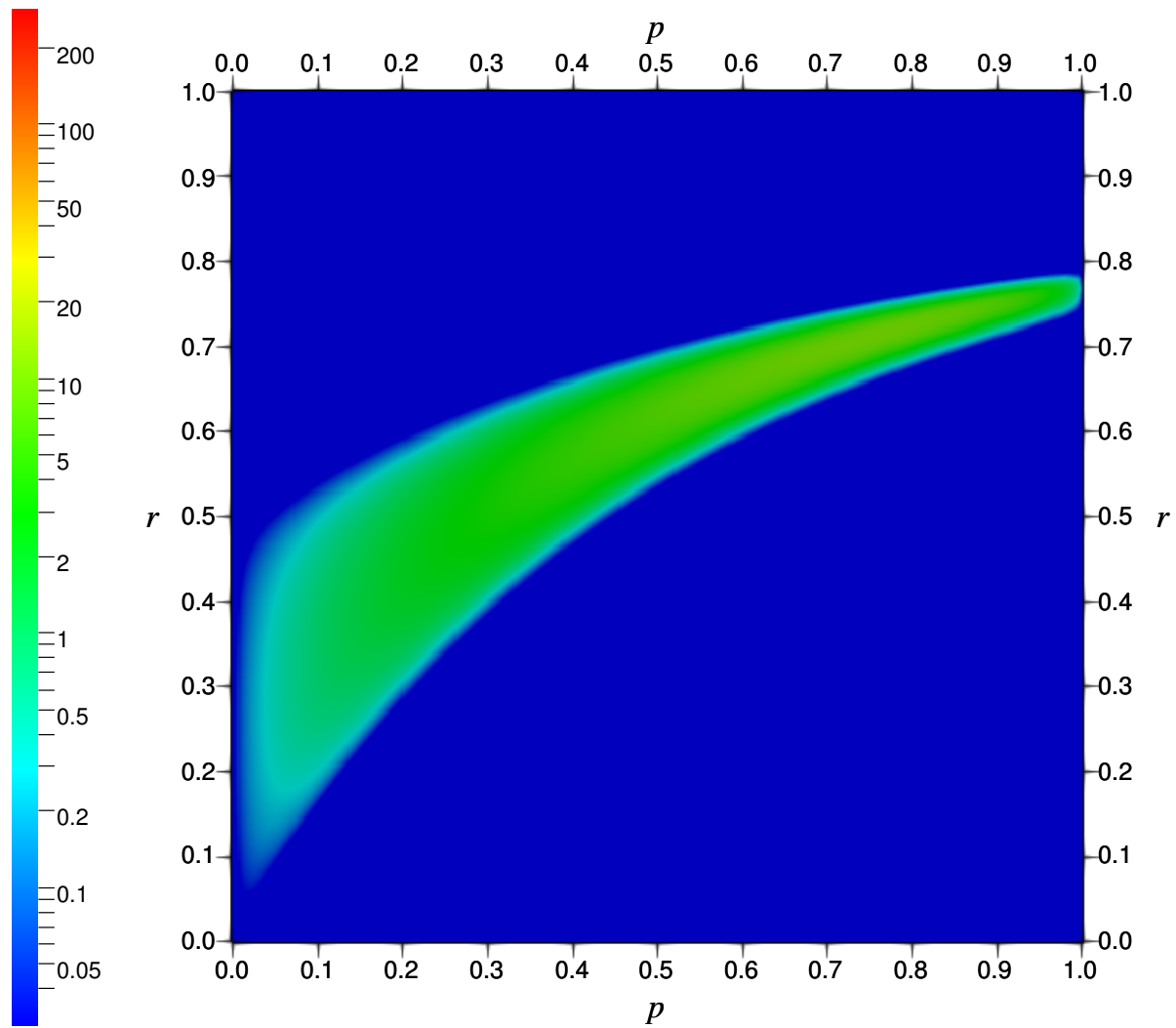


Figura 6.5: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t = 0,75; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

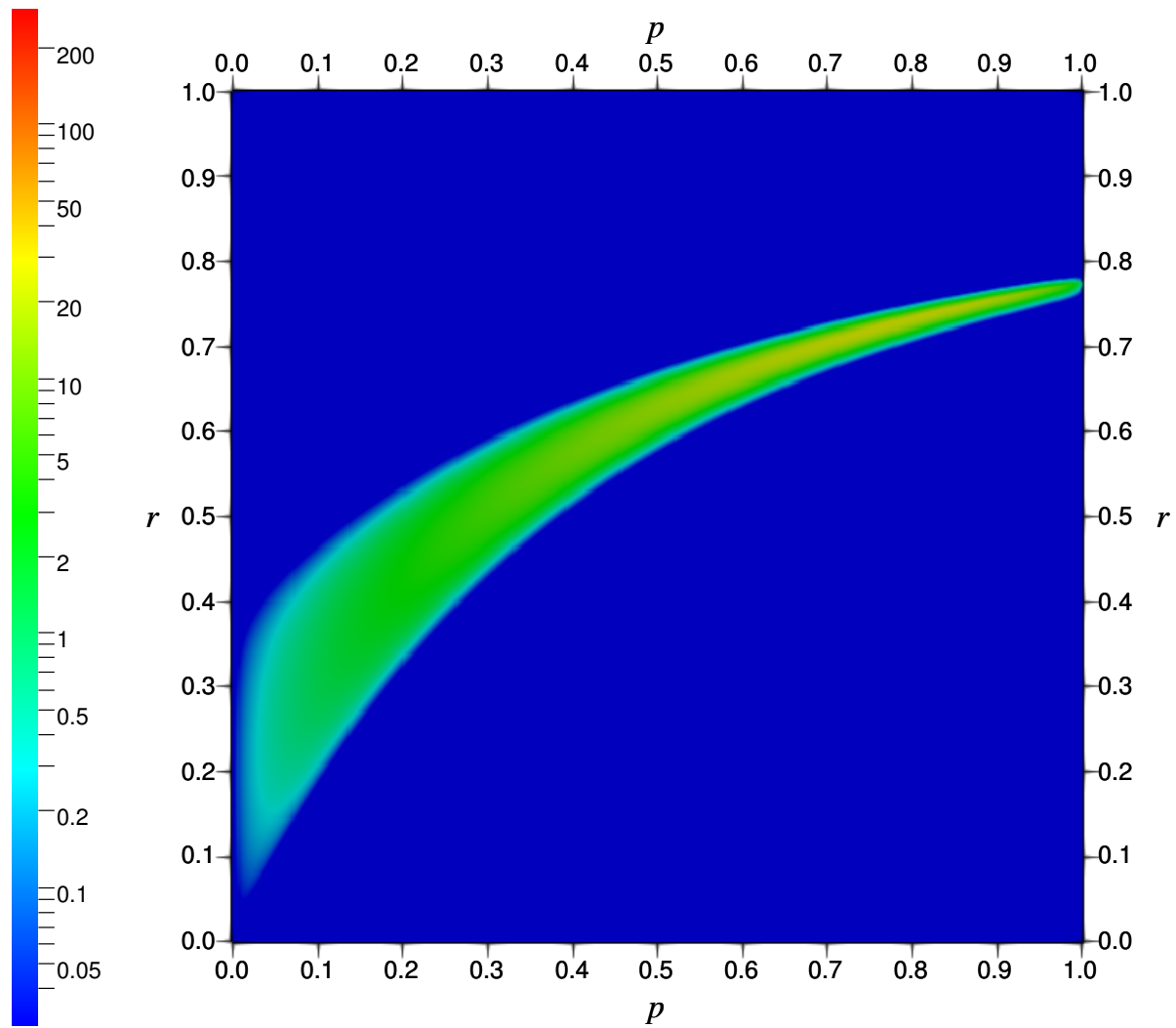


Figura 6.6: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t=1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1-r)$ y $l(p, r) = r$.

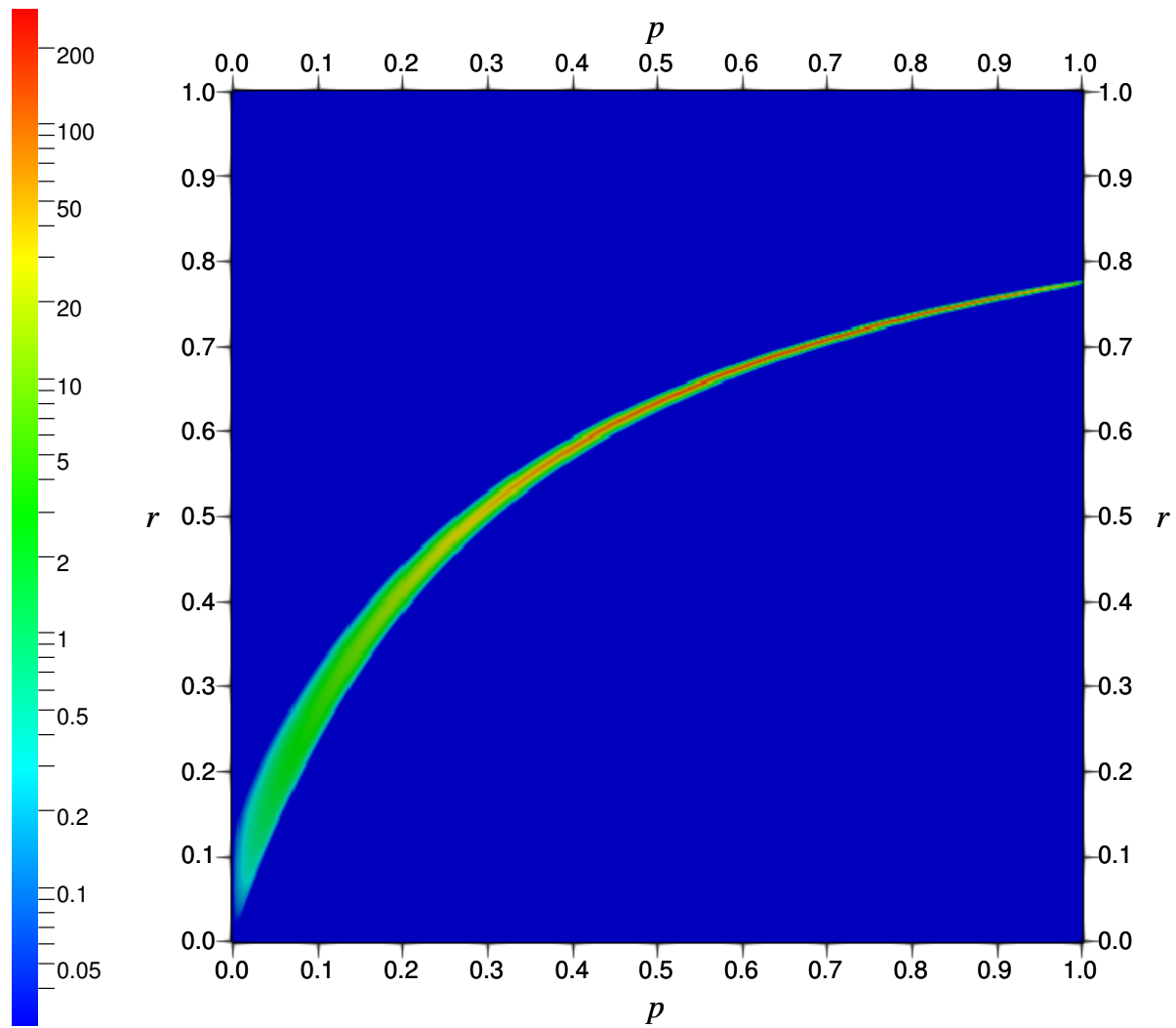


Figura 6.7: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t=2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1-r)$ y $l(p, r) = r$.

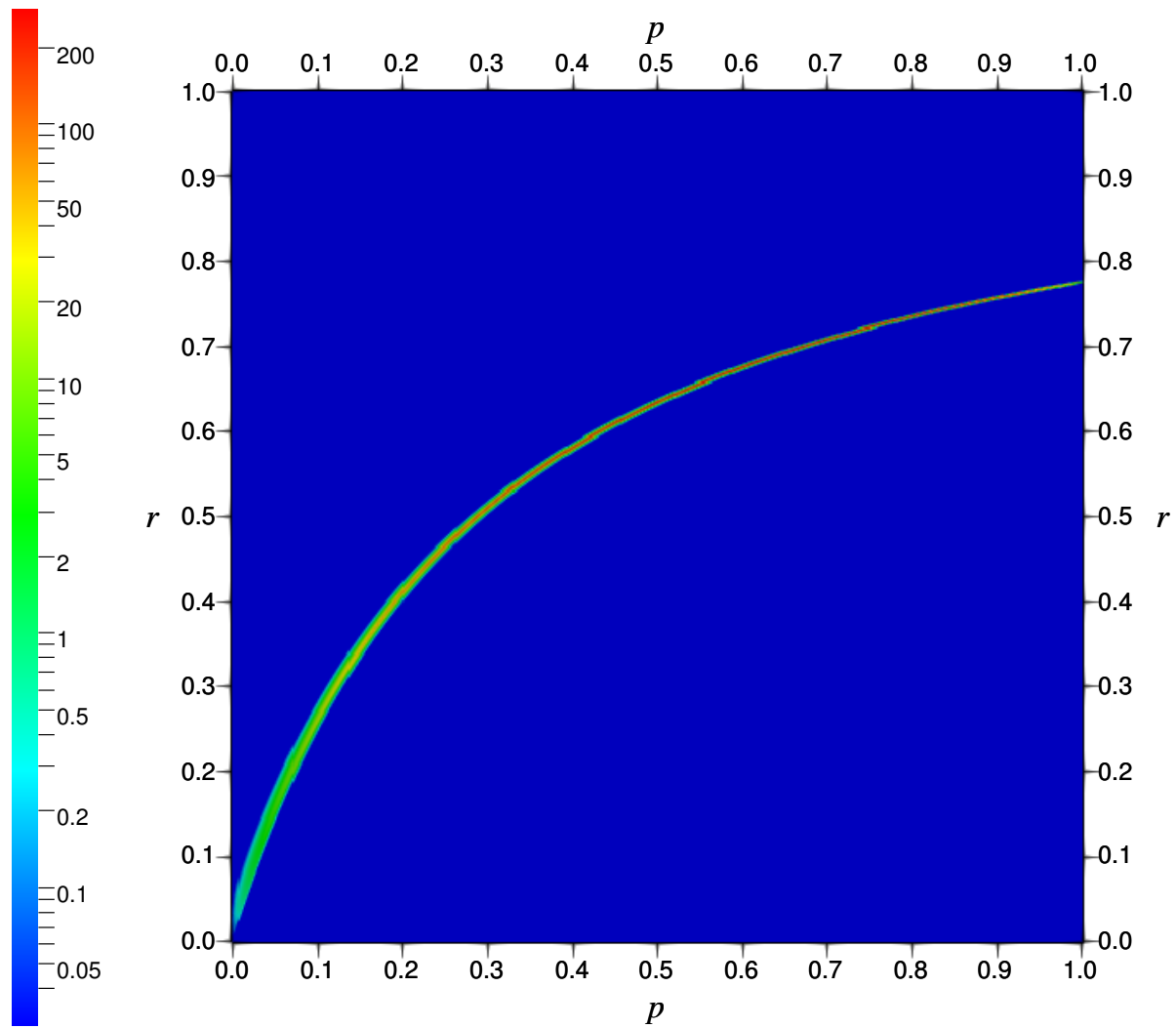


Figura 6.8: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t=3; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1-r)$ y $l(p, r) = r$.

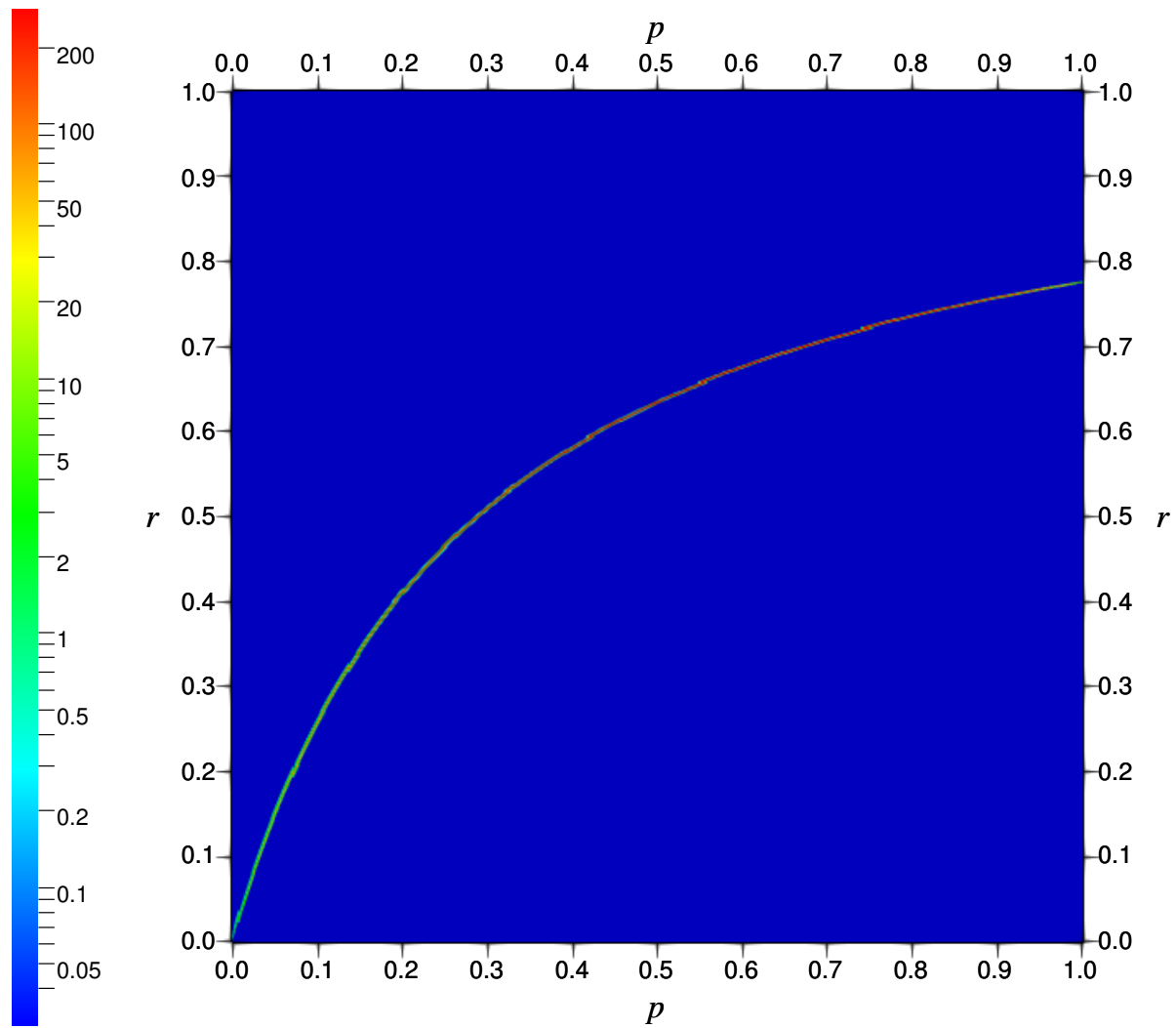


Figura 6.9: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t=5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1-r)$ y $l(p, r) = r$.

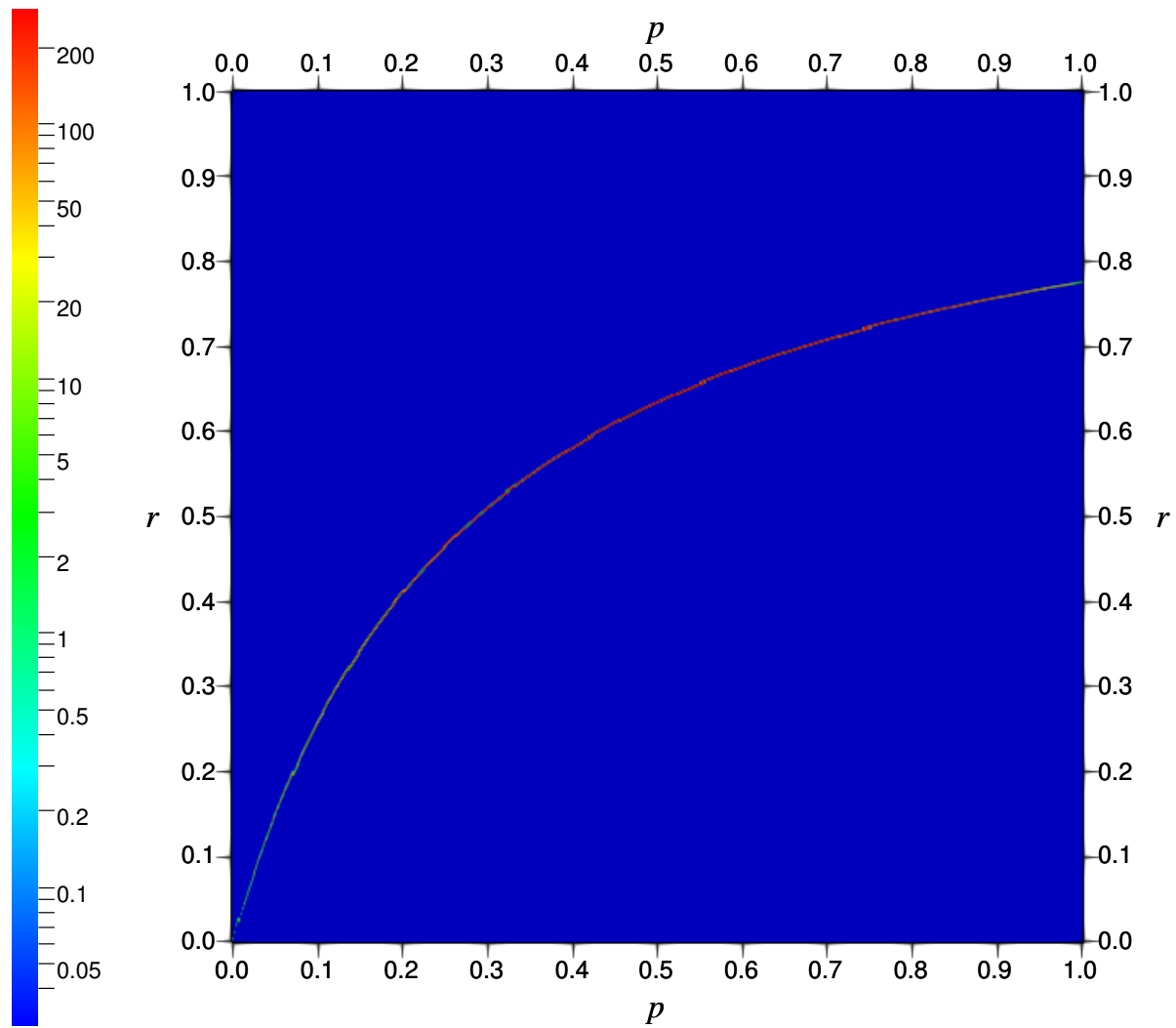


Figura 6.10: Ejemplo 1: Gráfico de $f_h(t=8; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1-r)$ y $l(p, r) = r$.

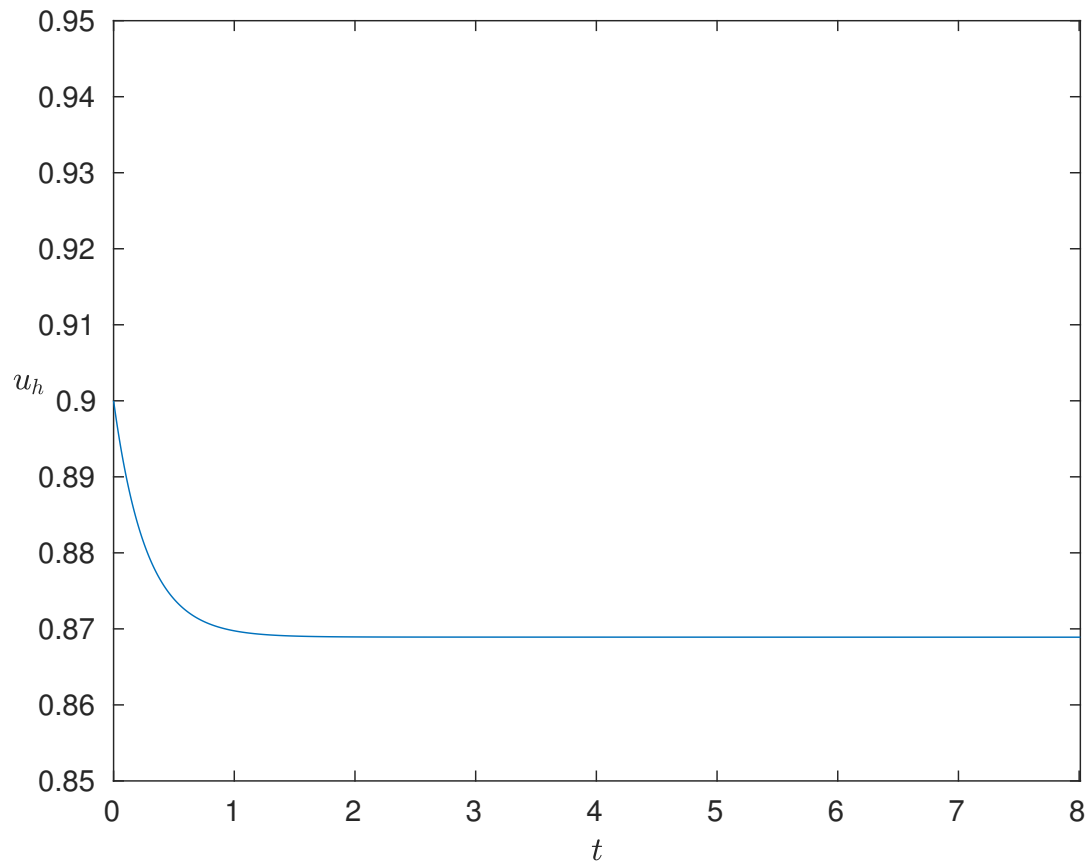


Figura 6.11: Ejemplo 1: Gráfico de u_h con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

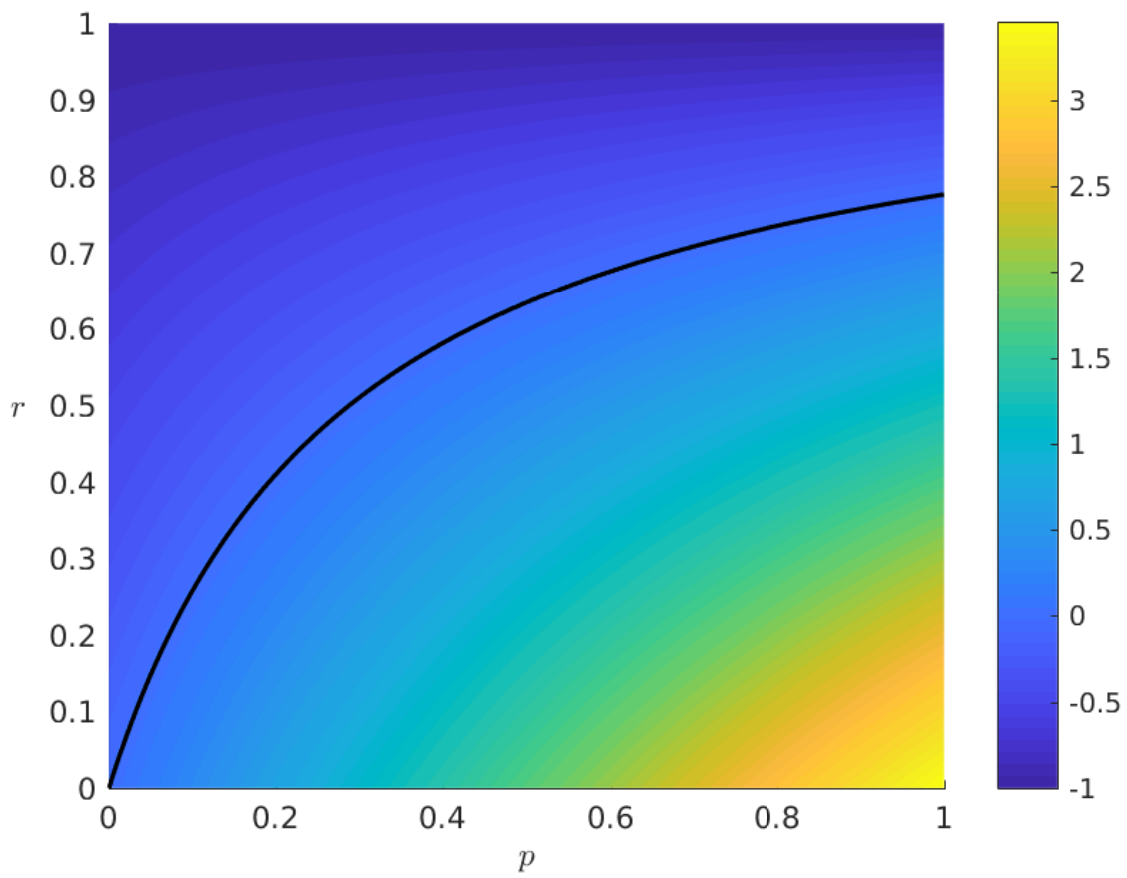


Figura 6.12: Ejemplo 1: Gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ con $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$, junto a la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$.

6.2. Ejemplo 2

En el ejemplo anterior se observa que el comportamiento asintótico de f_h depende de $\mathcal{V}$, por lo cual es natural intuir que el lugar donde se acumula f_h no depende de las condiciones iniciales. Esto motiva un segundo experimento que coincide con lo previsto.

Este ejemplo utiliza las mismas condiciones que el ejemplo anterior, es decir, $P = 1$ y $T = 8,01$, con tasas de adsorción y desorción

$$k(p, r) = 4p(1 - r), \quad l(p, r) = r,$$

y parámetros

$$u^{in} = 0,9$$

$$\rho = 1,$$

excepto la distribución inicial que se reemplaza por

$$f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p),$$

donde m es tal que

$$u^{in} + \int_0^P \int_0^1 r p f^{in}(p, r) dr dp = \rho.$$

En este caso también se calculó que $\Delta t \approx 2,4975 \times 10^{-4}$.

Las figuras 6.13, 6.14, 6.15, 6.16, 6.17, 6.18, 6.19, 6.20, 6.21 y 6.22 muestran a f_h para distintos tiempos y la figura 6.23 muestra a u_h . Además, la figura 6.48 muestra $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$, donde la línea negra corresponde a $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$.

Como se puede observar al comparar este ejemplo con el anterior, una función f^{in} distinta no cambia la curva donde f_h se acumula.

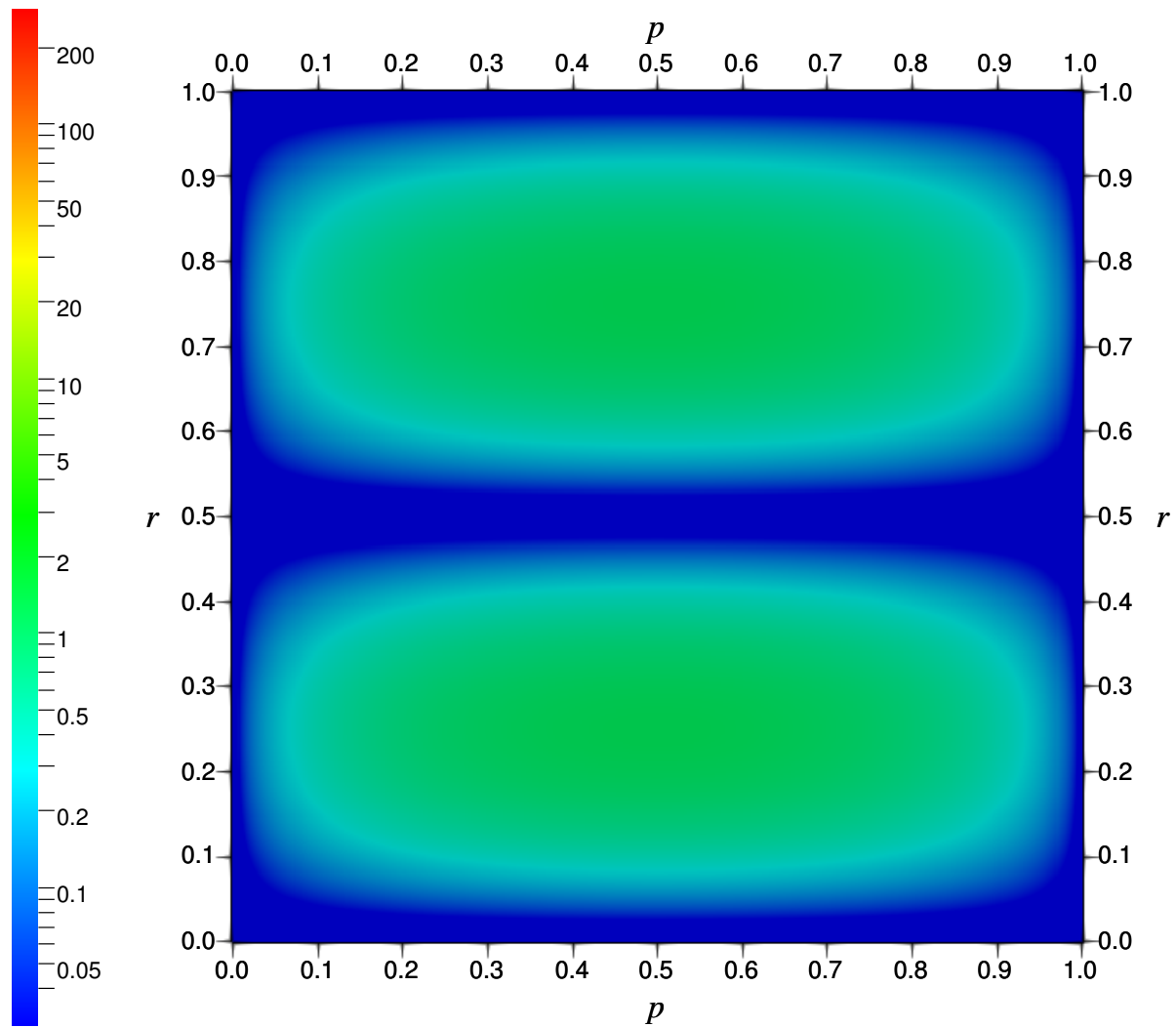


Figura 6.13: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t=0; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

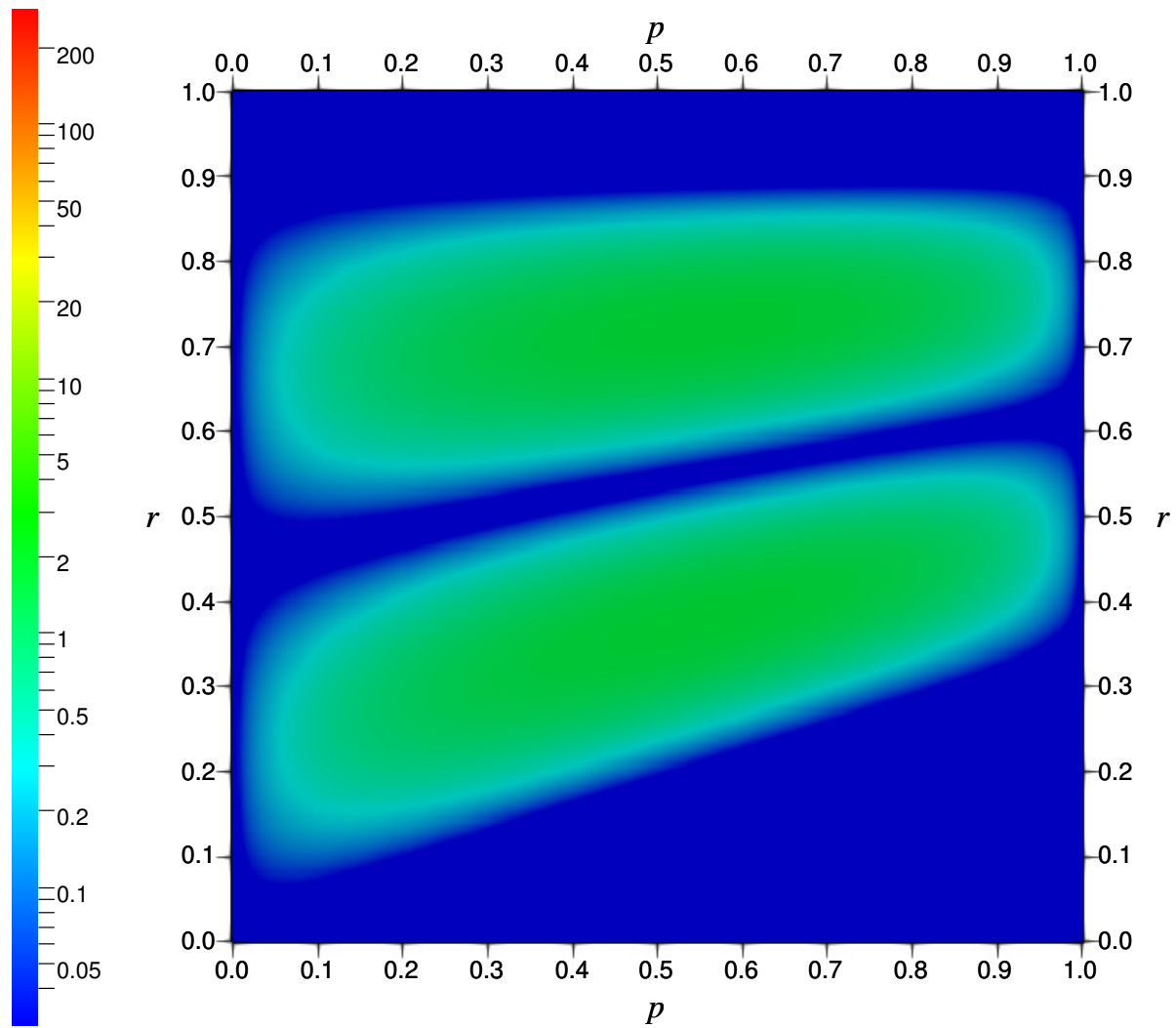


Figura 6.14: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 0,125; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

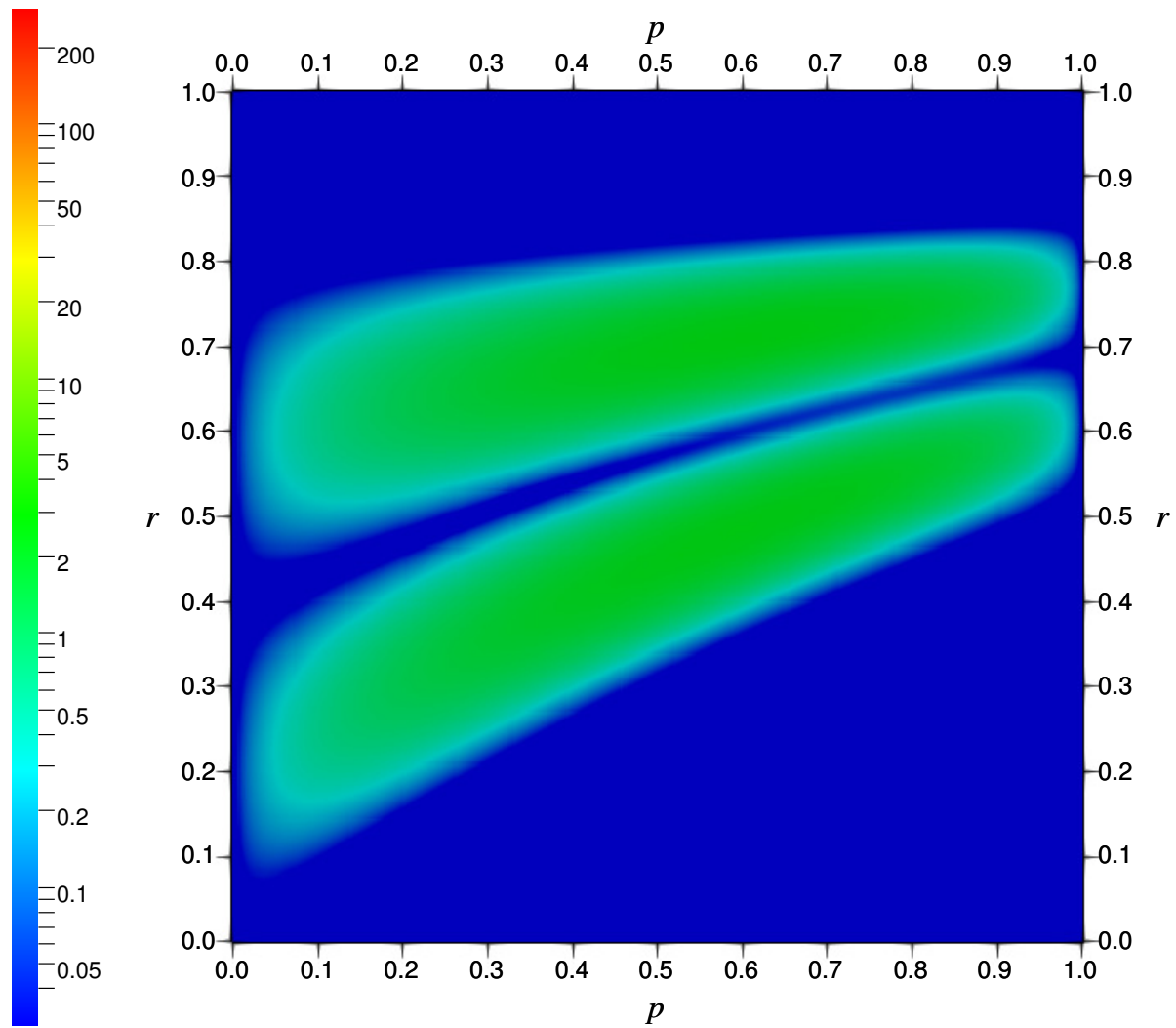


Figura 6.15: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 0,25; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

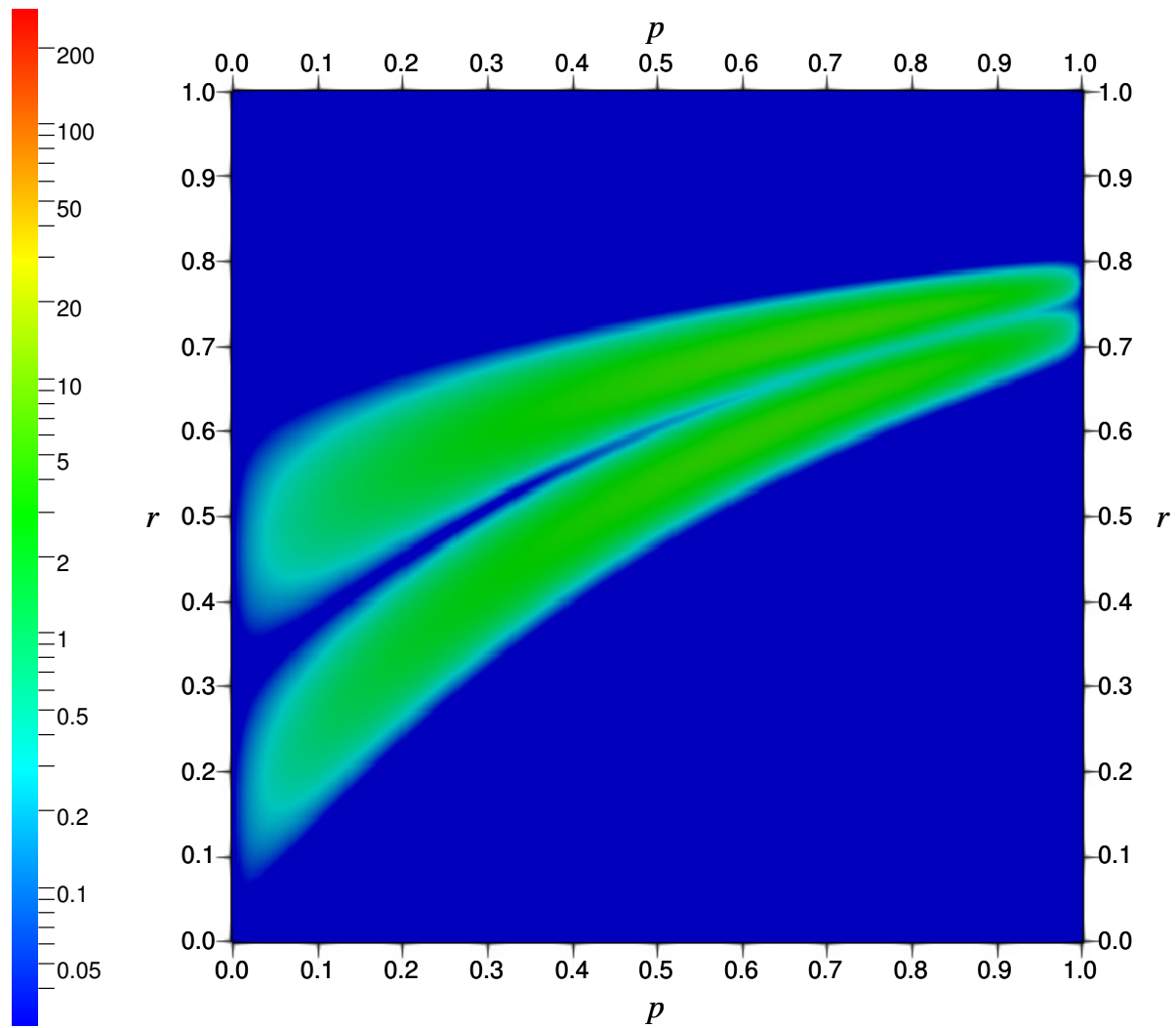


Figura 6.16: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 0,5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

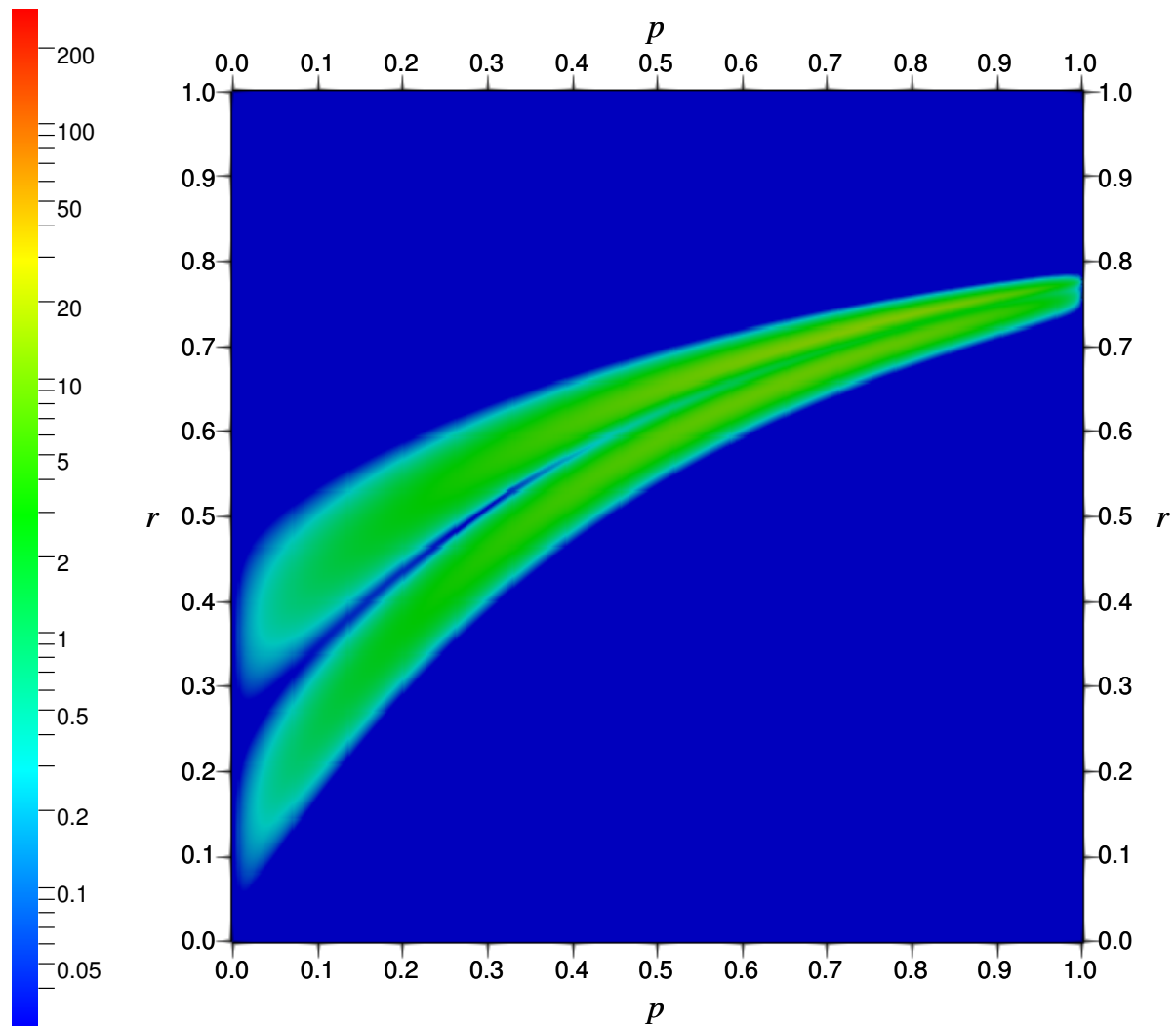


Figura 6.17: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 0,75; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

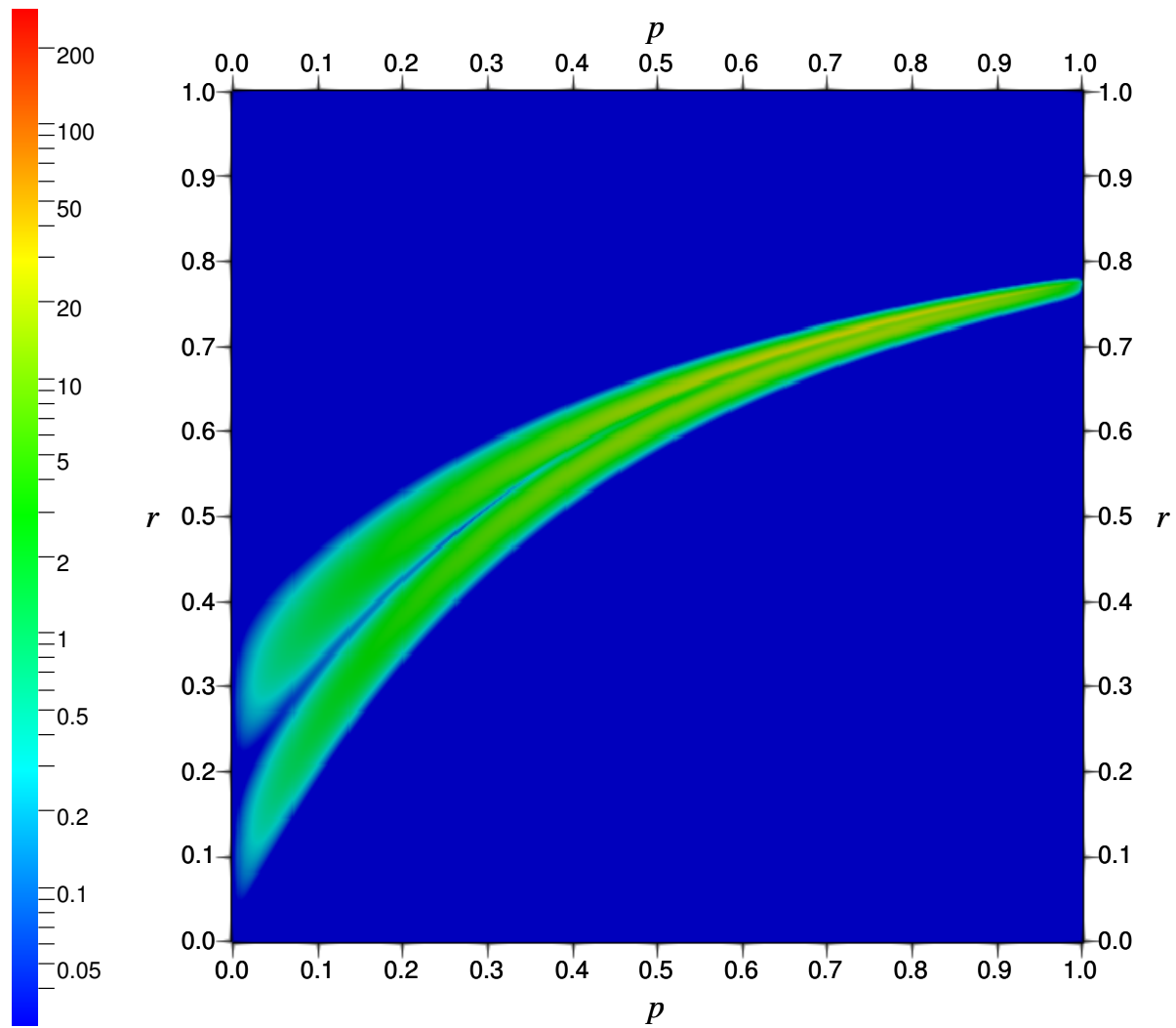


Figura 6.18: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t=1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

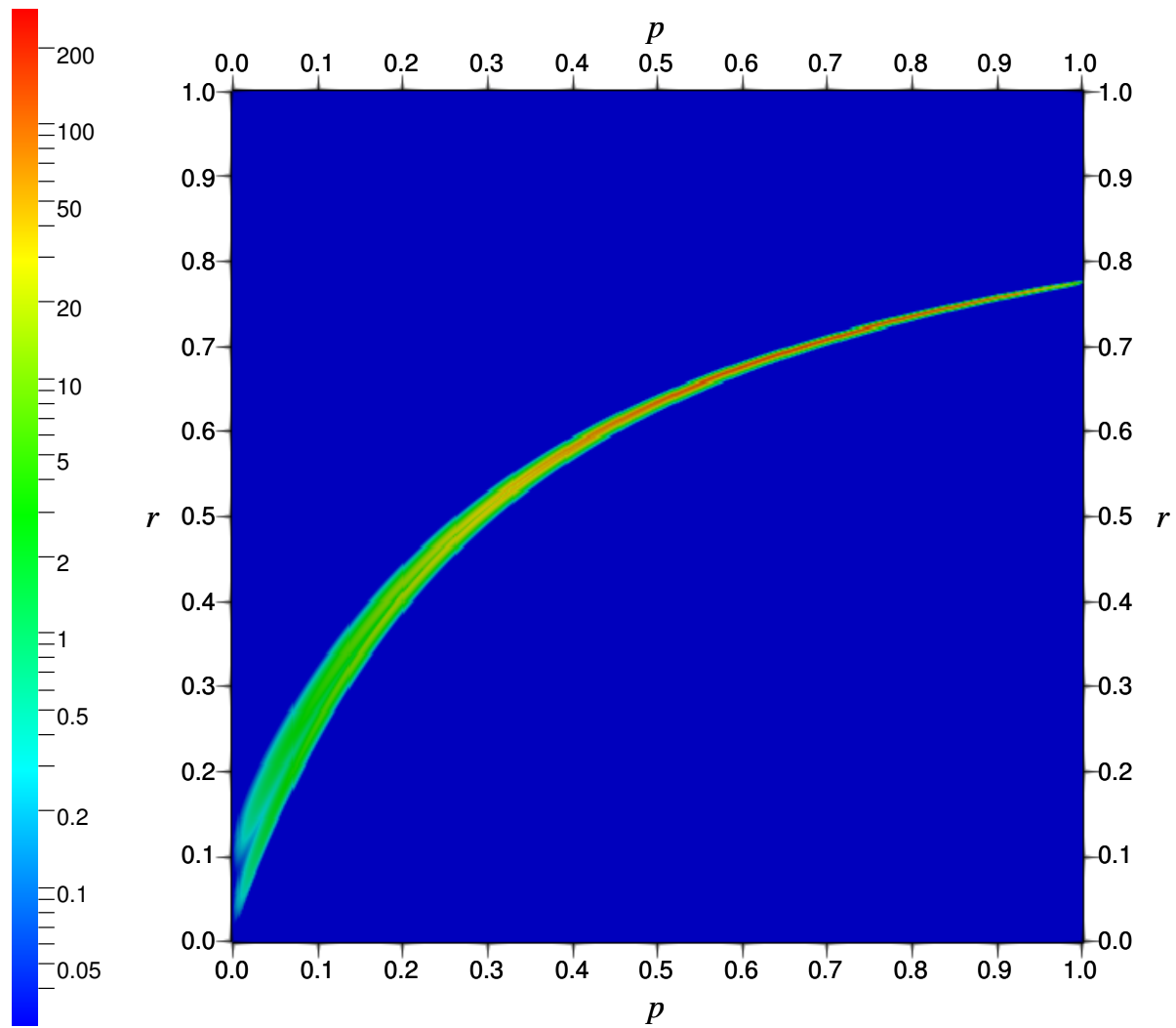


Figura 6.19: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t=2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

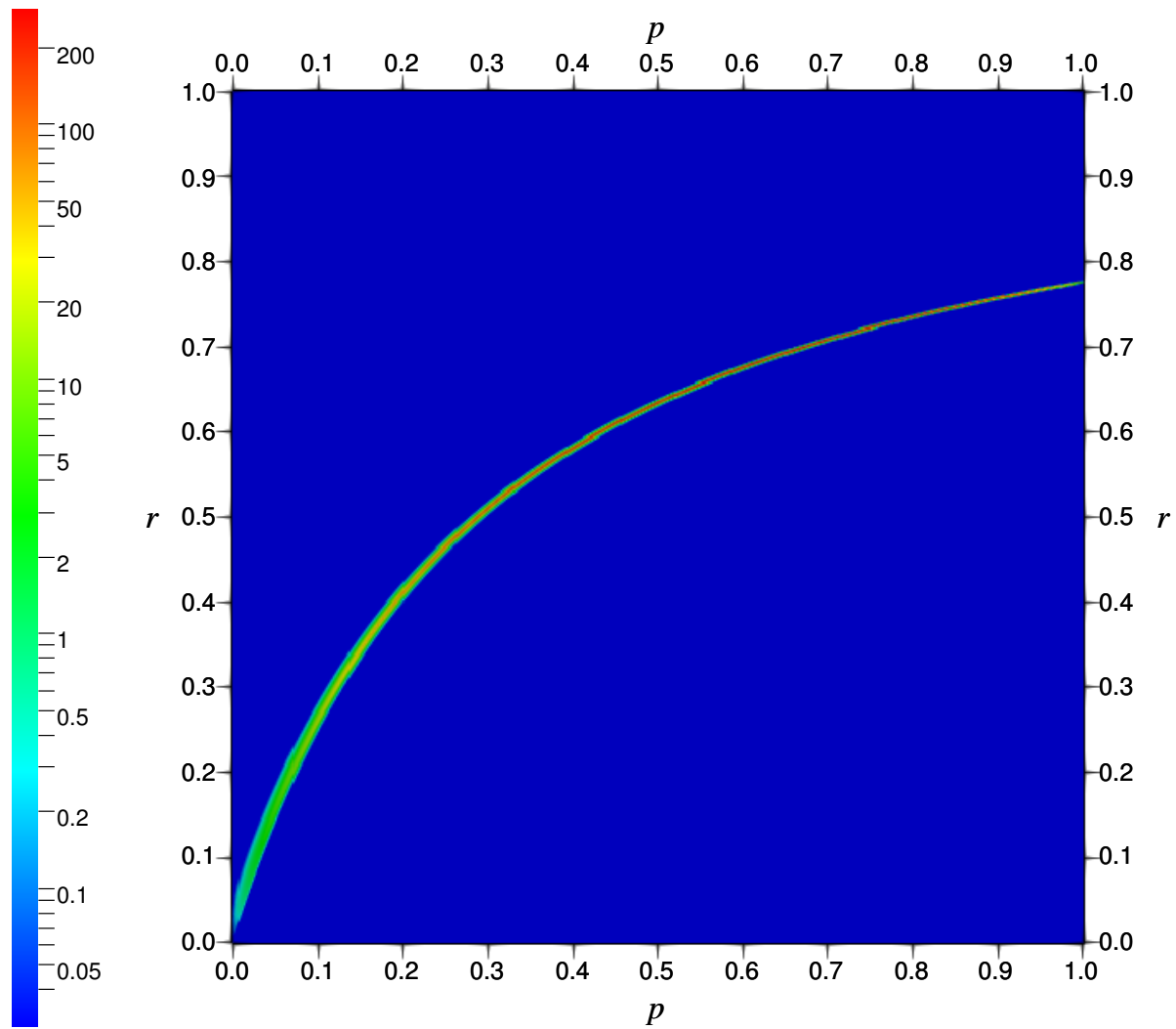


Figura 6.20: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t=3; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

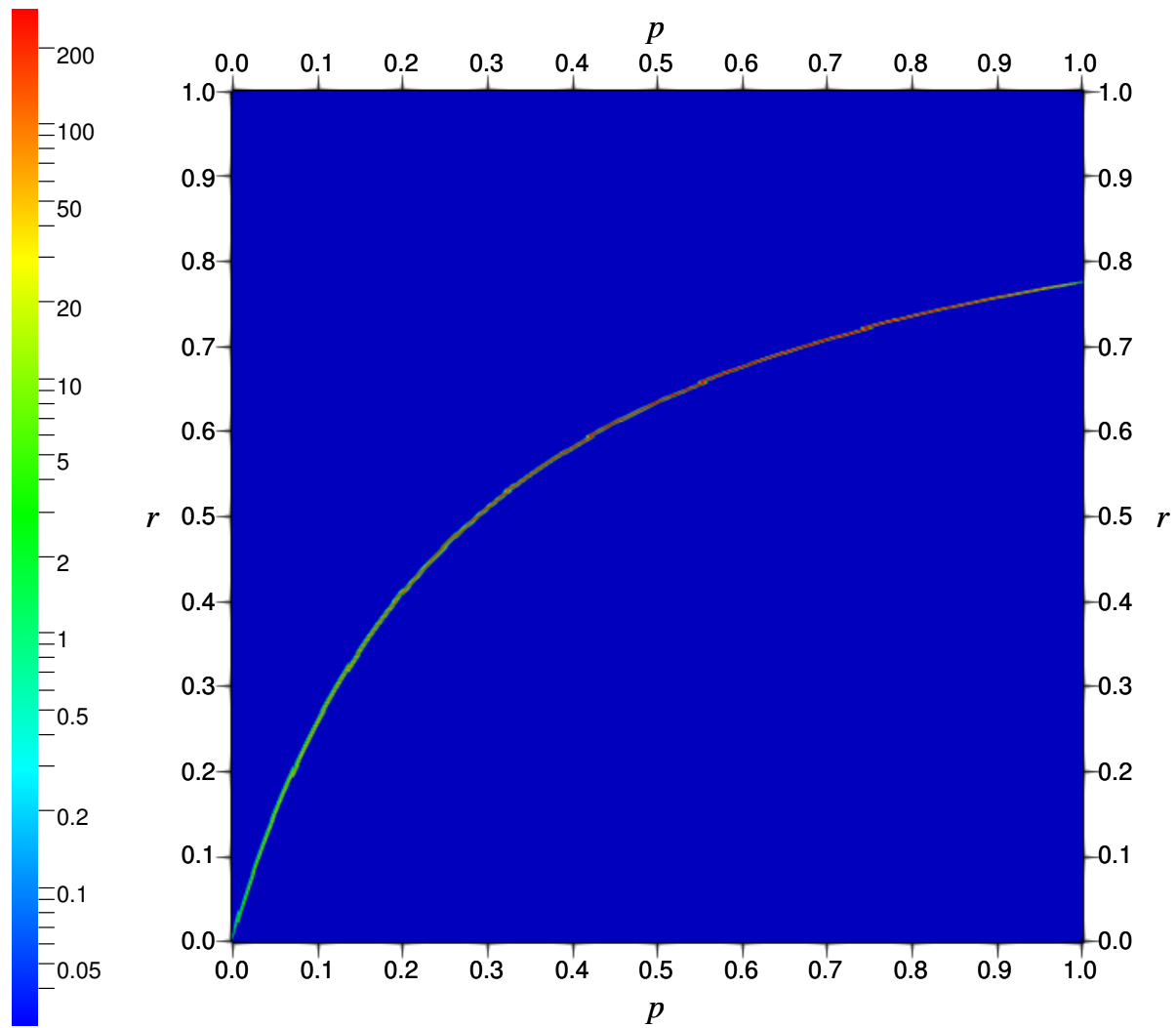


Figura 6.21: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

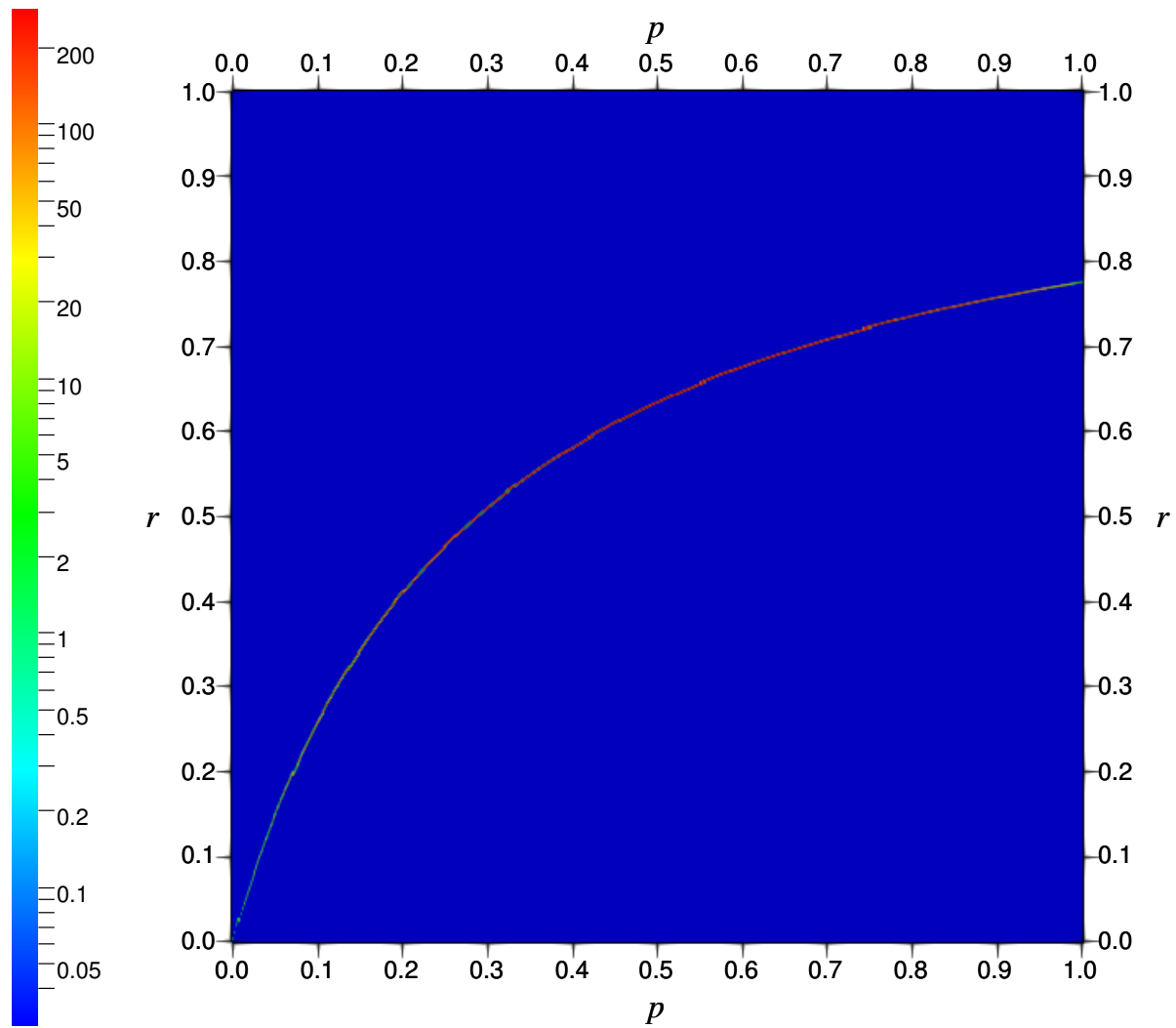


Figura 6.22: Ejemplo 2: Gráfico de $f_h(t = 8; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

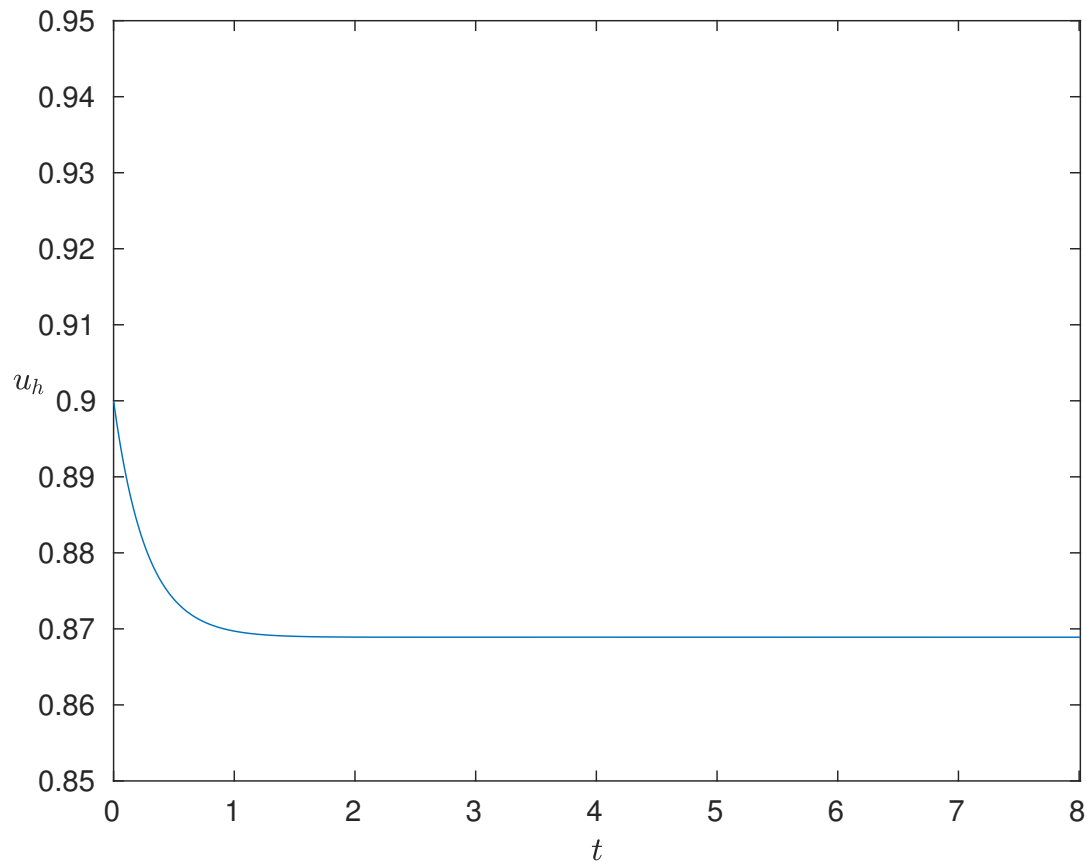


Figura 6.23: Ejemplo 2: Gráfico de u_h con $f^{in}(p, r) = m \cdot (1 - \cos(4\pi r))p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$.

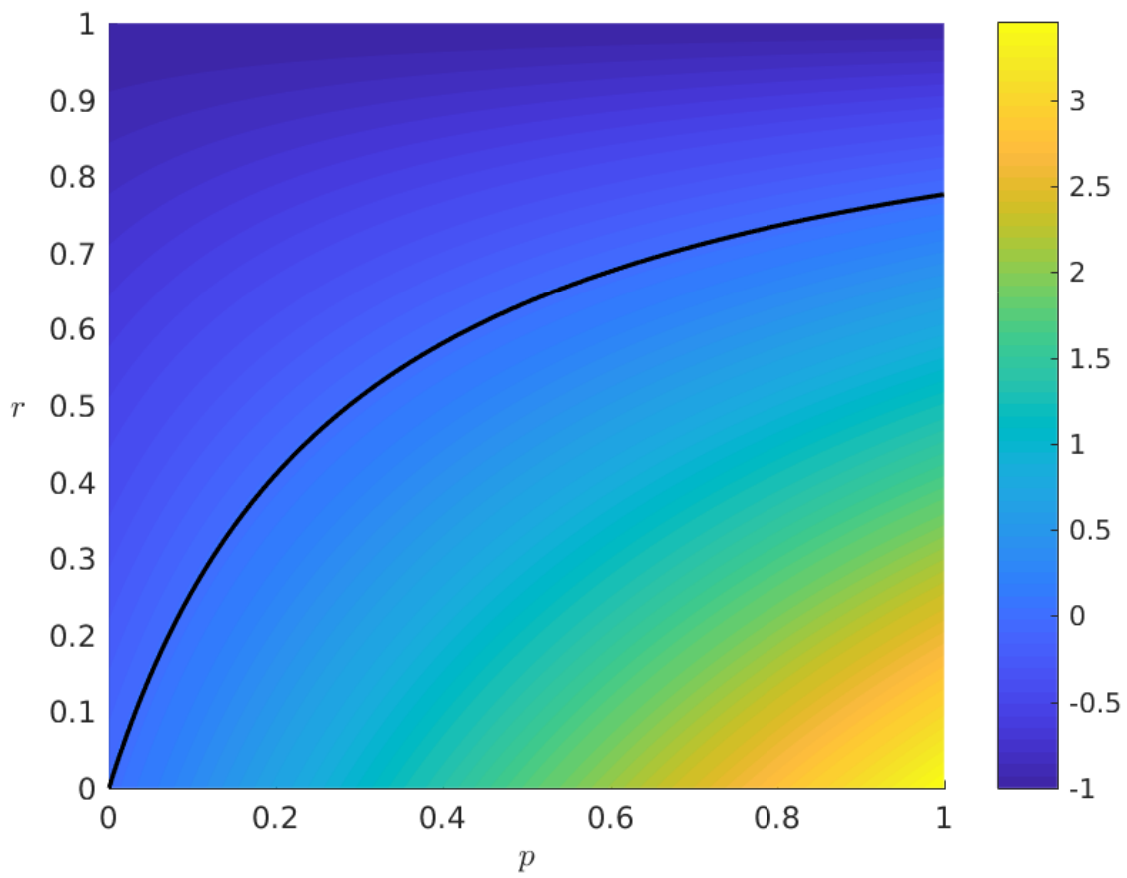


Figura 6.24: Ejemplo 2: Gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ con $k(p, r) = 4p(1 - r)$ y $l(p, r) = r$, junto a la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$.

6.3. Ejemplo 3

Para $P = 1$ y $T = 20,01$, se utilizan las tasas de adsorción y desorción

$$k(p, r) = k_0 p^\alpha (1 - r)^\alpha, \quad l(p, r) = l_0 p^\beta r^\beta,$$

con $k_0 = 0,5$, $l_0 = 0,8$, $\alpha = 1/3$, $\beta = 2/3$, y con distribución inicial

$$f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p).$$

Los parámetros utilizados son

$$u^{in} = 0,9$$

$$\rho = 1,$$

donde m es tal que

$$u^{in} + \int_0^P \int_0^1 r p f^{in}(p, r) dr dp = \rho.$$

Se calculó que $\Delta t = \tau = 0,001$.

Las figuras 6.25, 6.26, 6.27, 6.28, 6.29, 6.30, 6.31, 6.32, 6.33 y 6.34 muestran a f_h para distintos tiempos y la figura 6.35 muestra a u_h . Además, la figura 6.48 muestra $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$, donde la línea negra corresponde a $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$.

Observar que, en este caso, las tasas de adsorción y desorción violan la hipótesis (H2) debido a que $k, l \notin W^{2,\infty}(\mathcal{S}_P)$. El comportamiento de f_h y u_h es similar a los dos ejemplos anteriores.

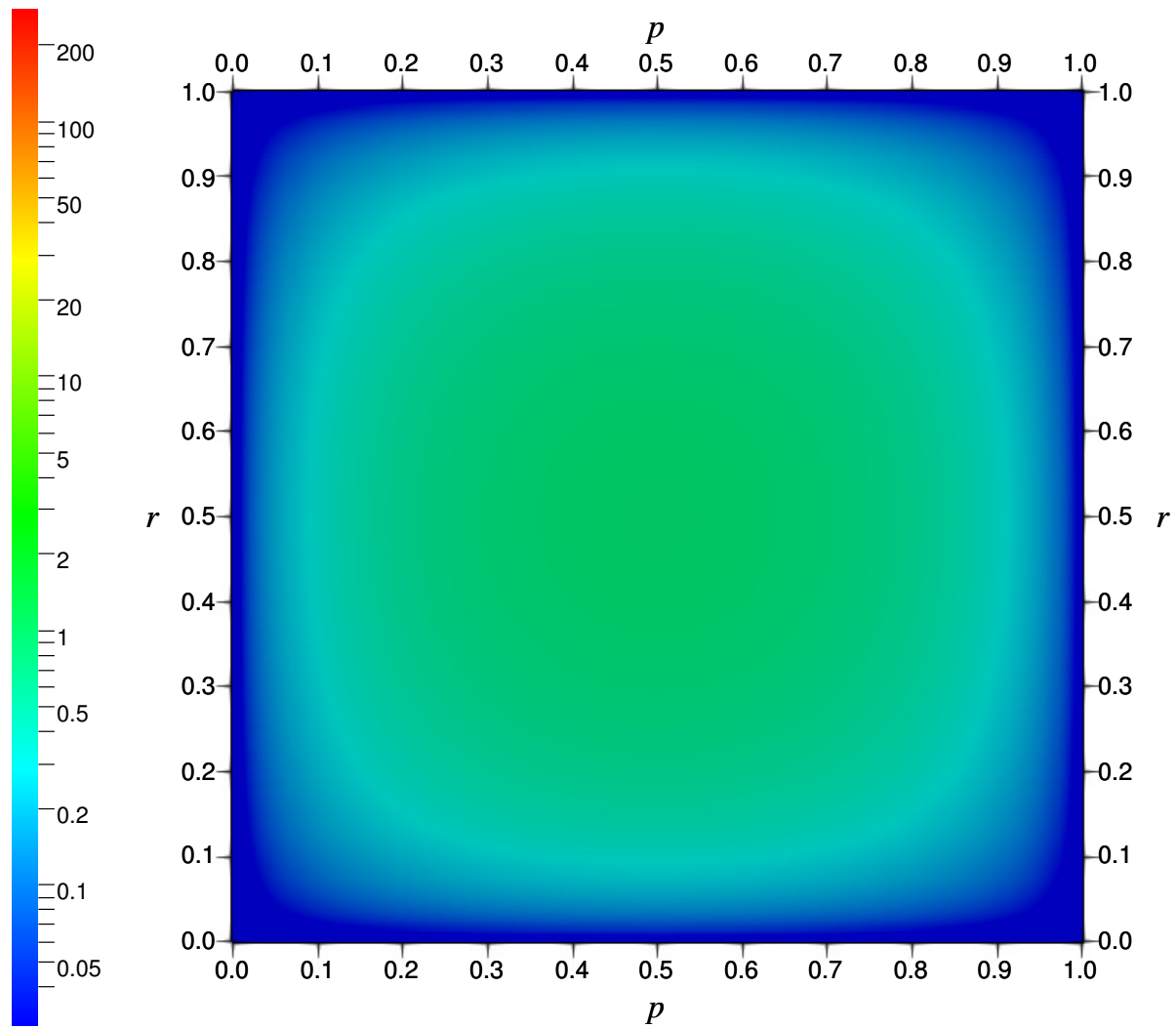


Figura 6.25: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t=0; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1-r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

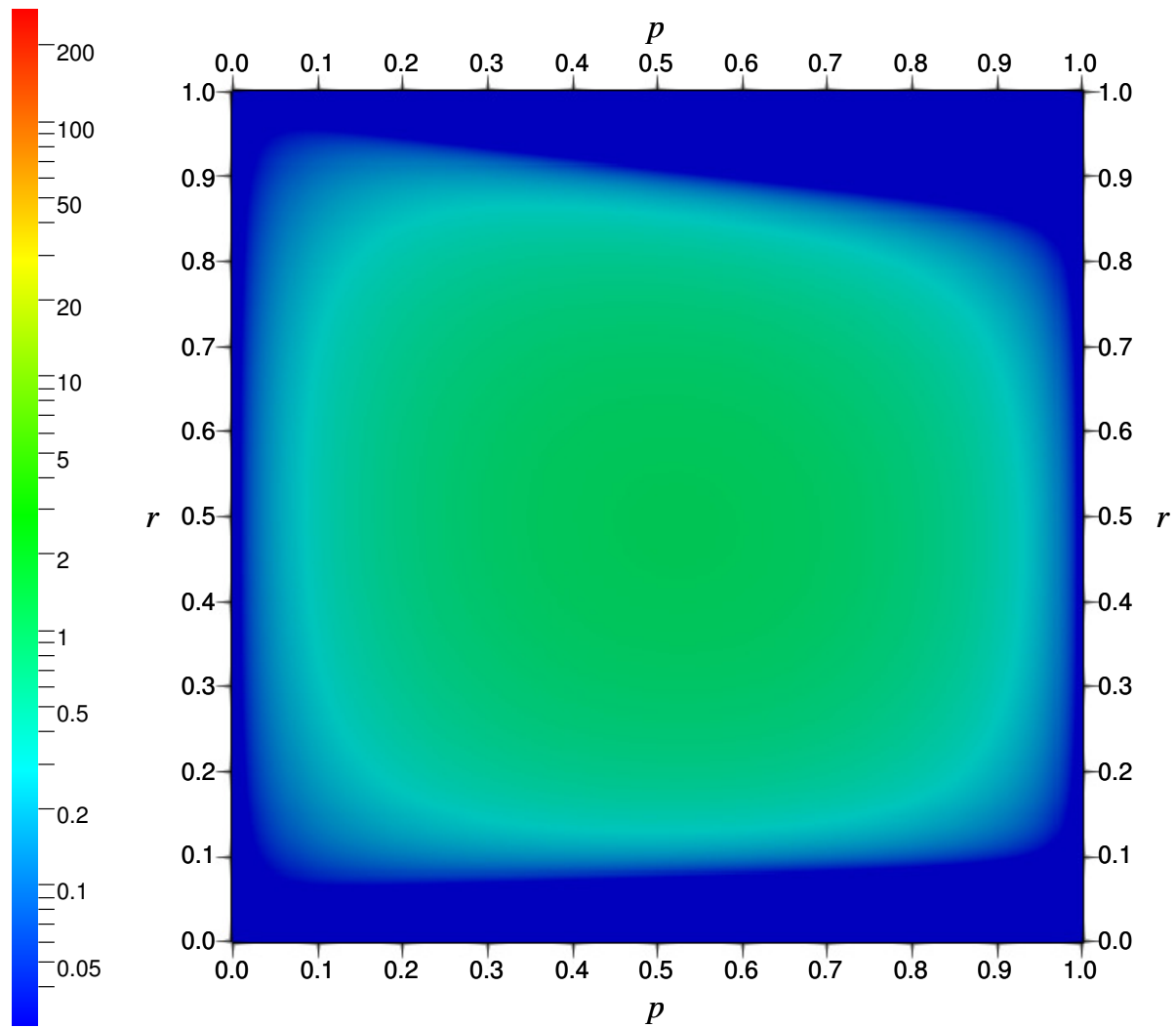


Figura 6.26: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 0,25; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

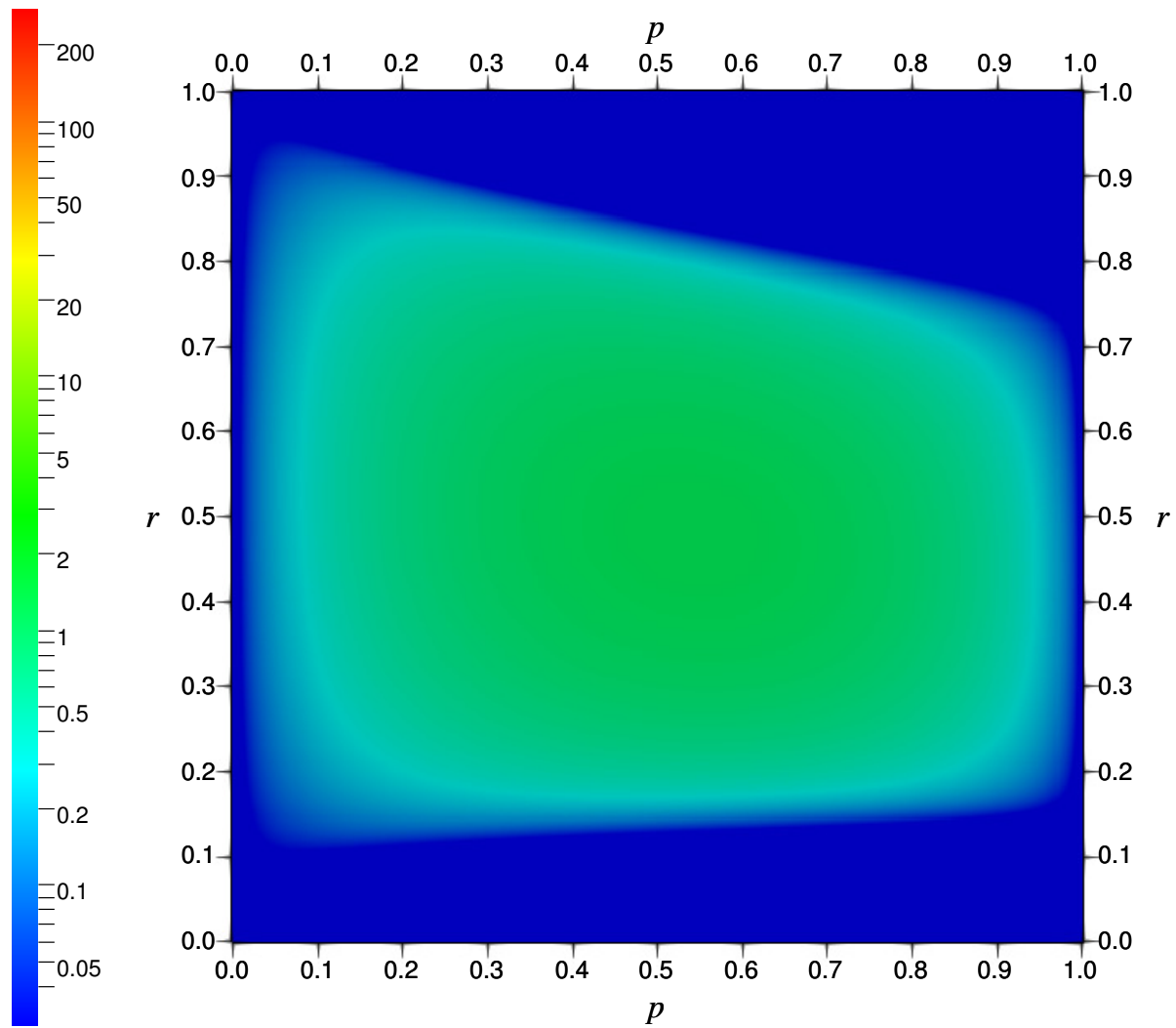


Figura 6.27: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 0,5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

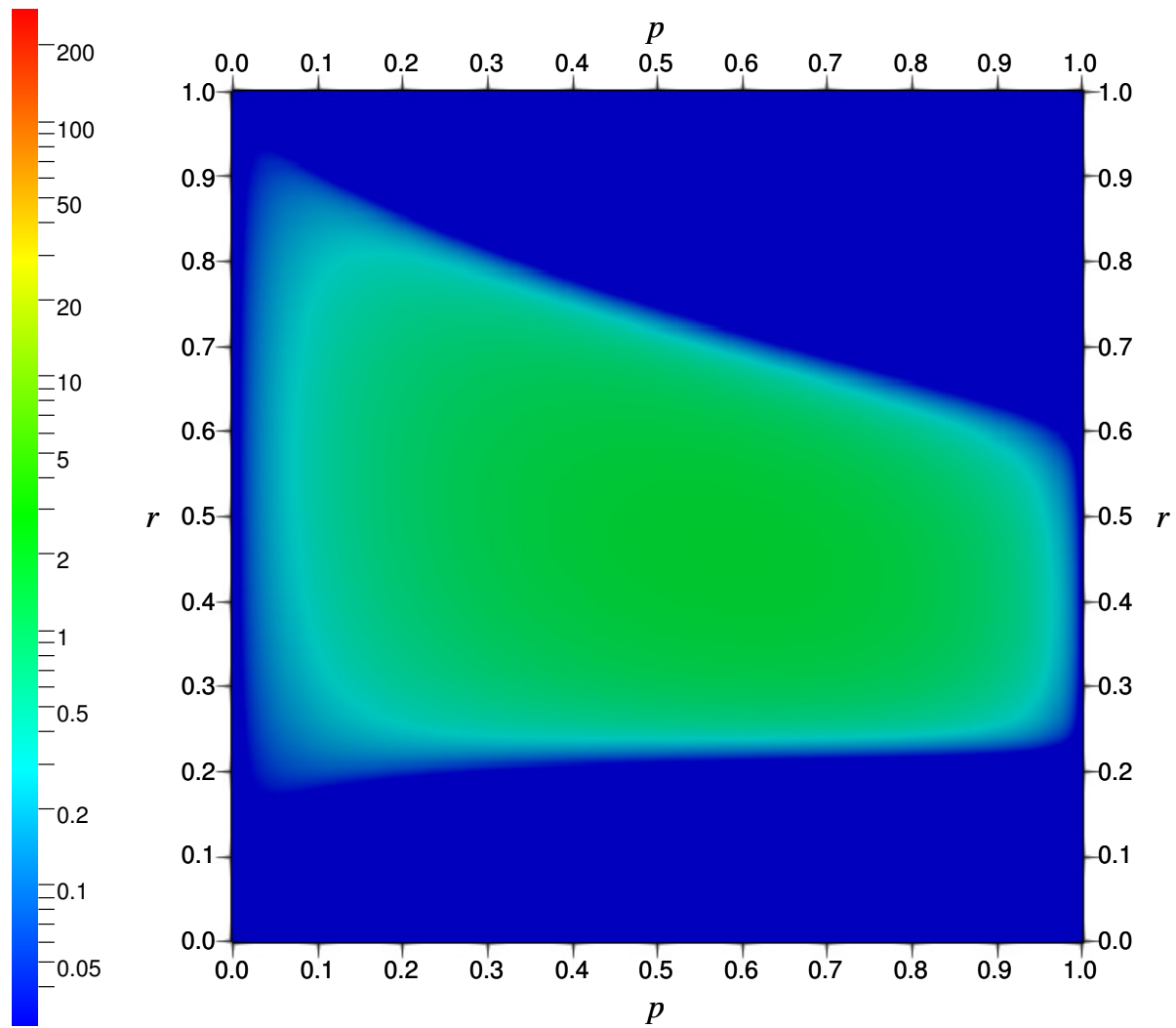


Figura 6.28: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t=1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1-r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

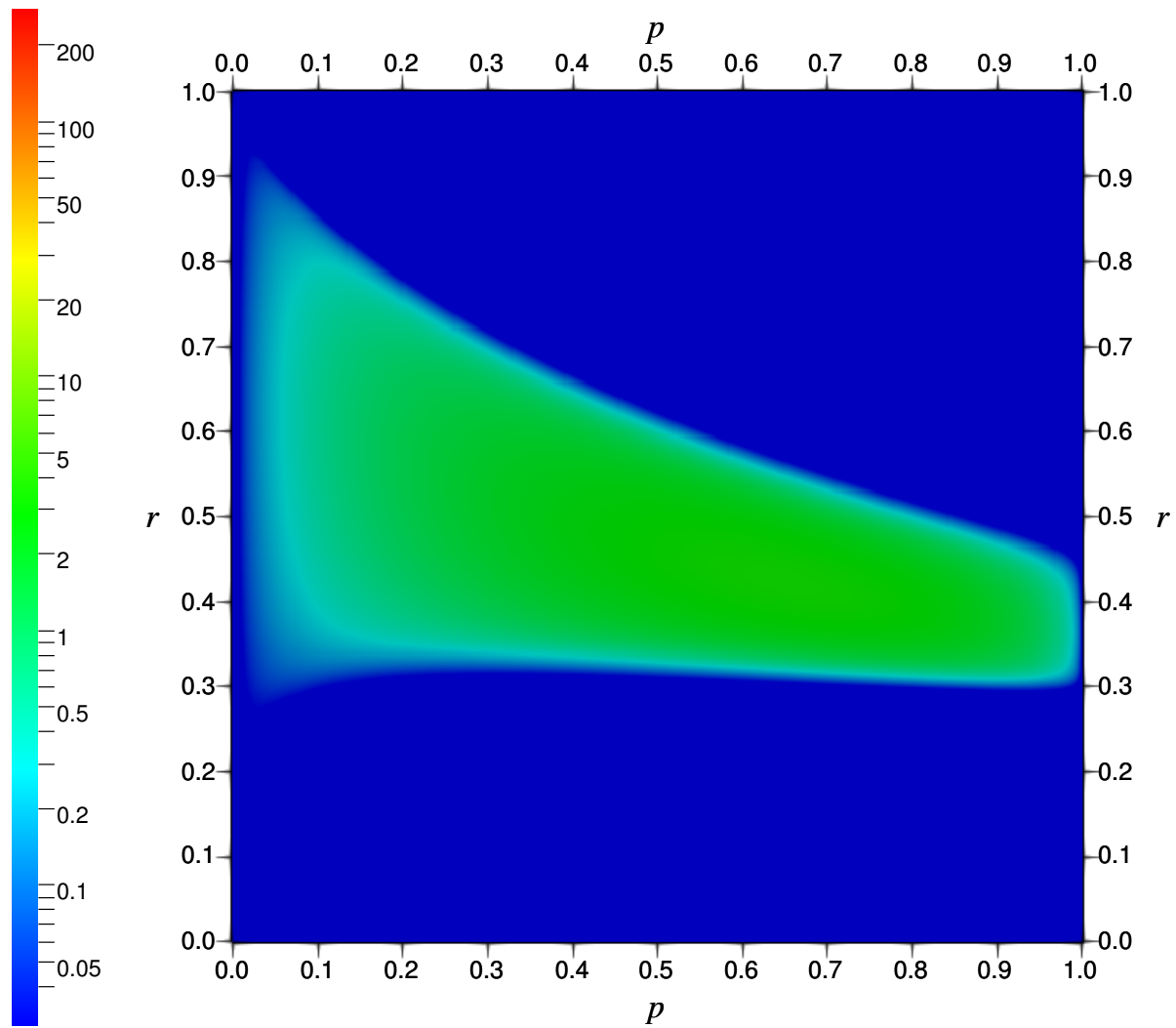


Figura 6.29: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t=2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1-r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

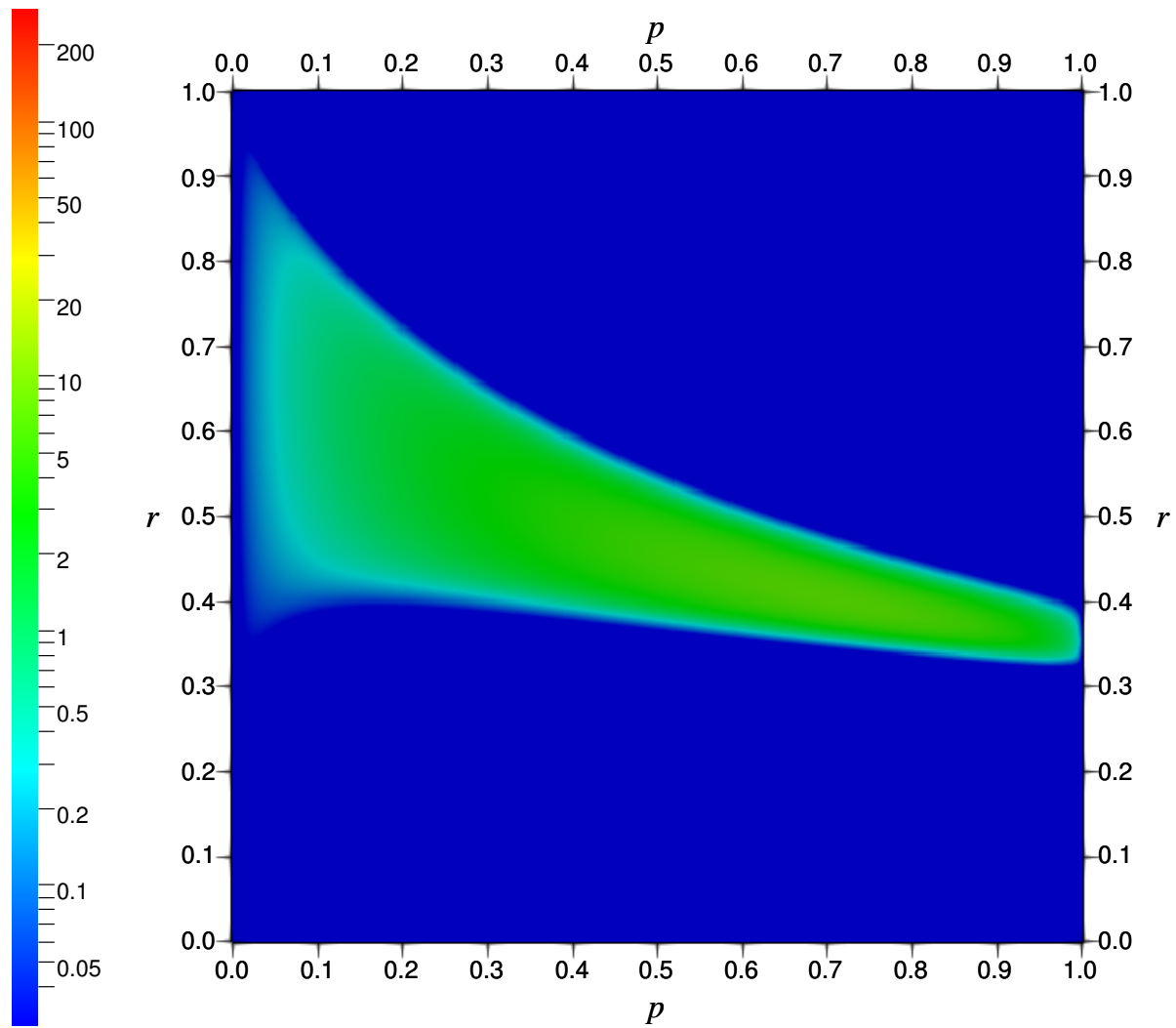


Figura 6.30: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t=3; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1-r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

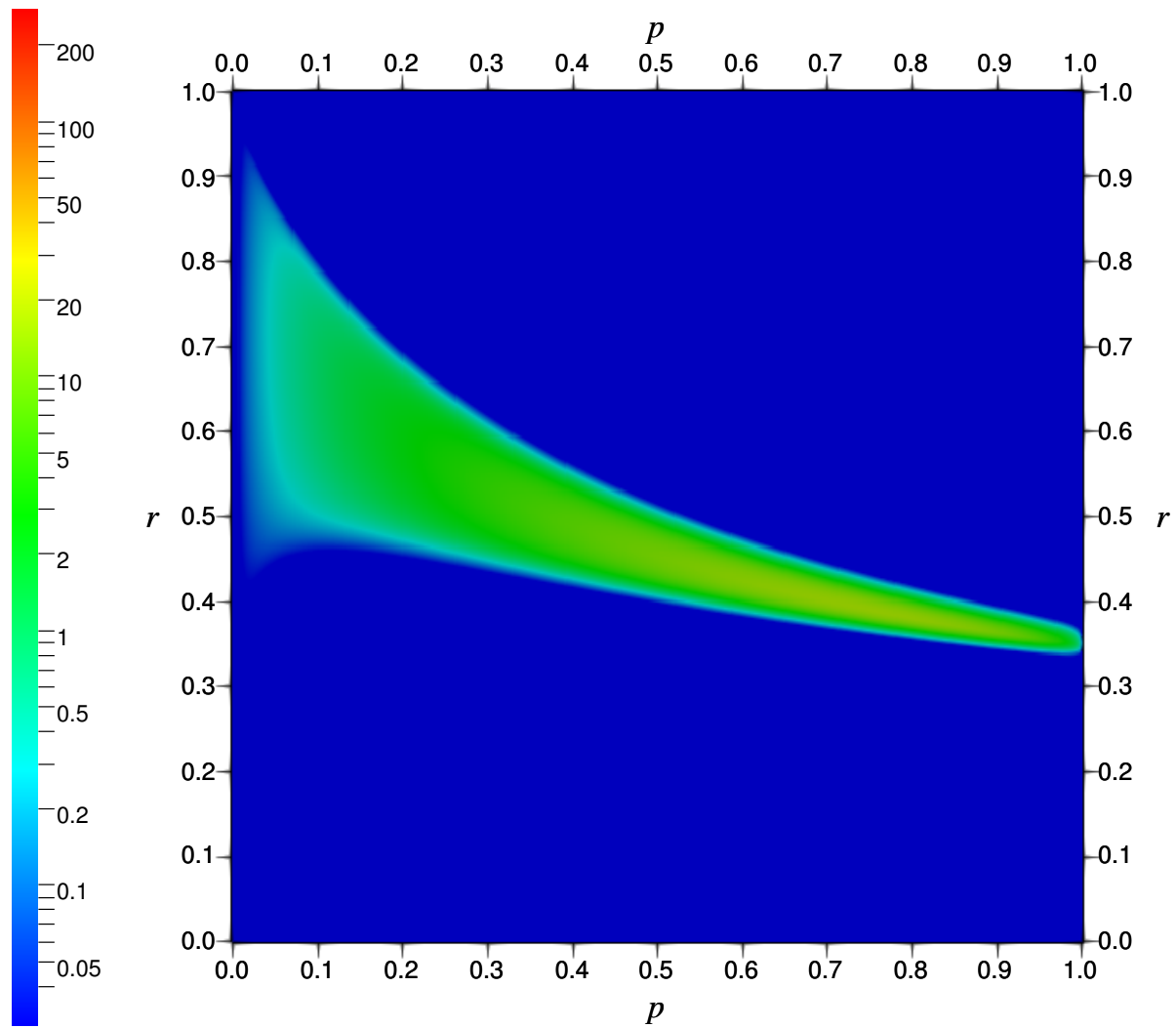


Figura 6.31: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t=4; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1-r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

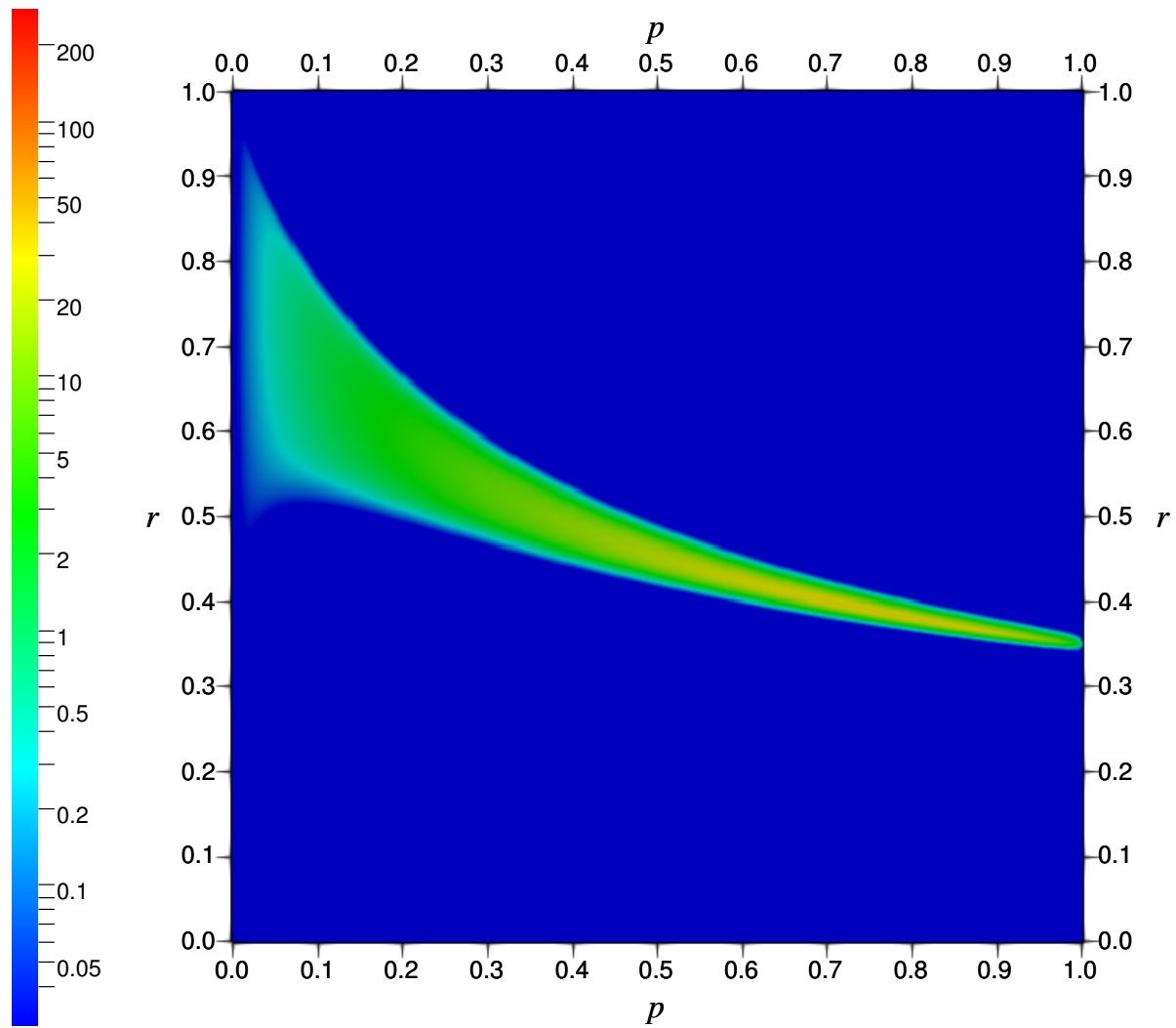


Figura 6.32: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t=5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1-r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

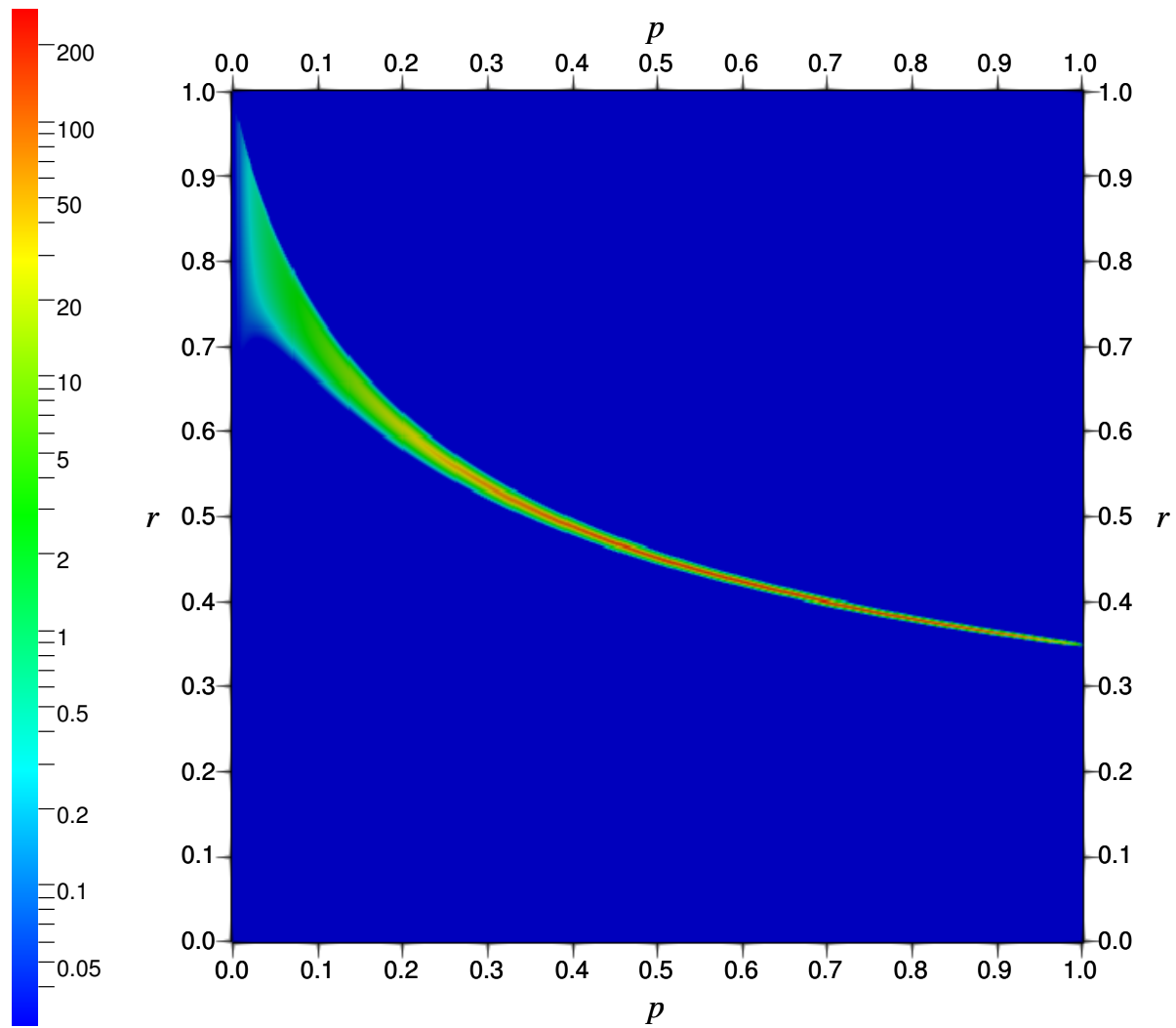


Figura 6.33: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 10; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

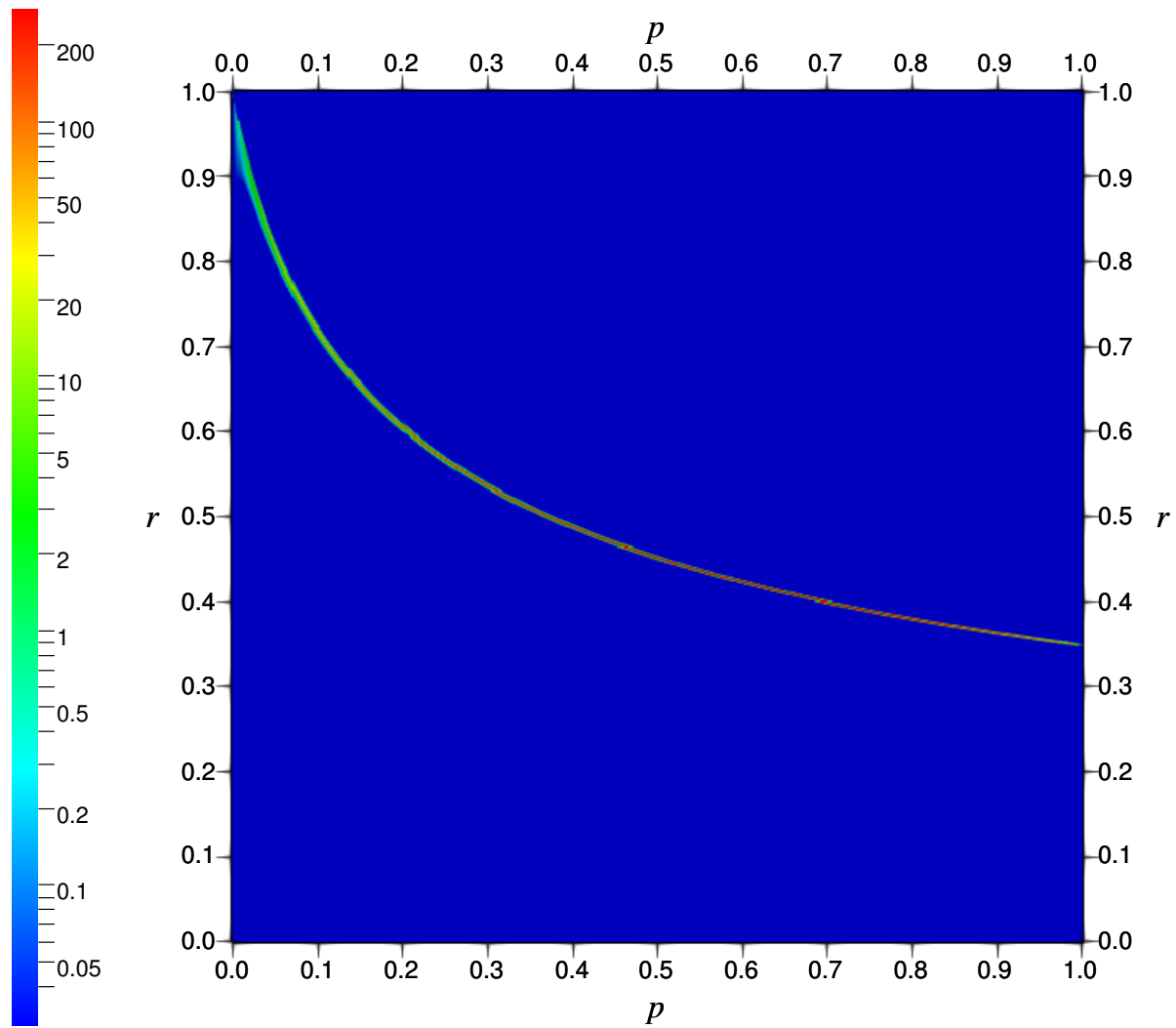


Figura 6.34: Ejemplo 3: Gráfico de $f_h(t = 20; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

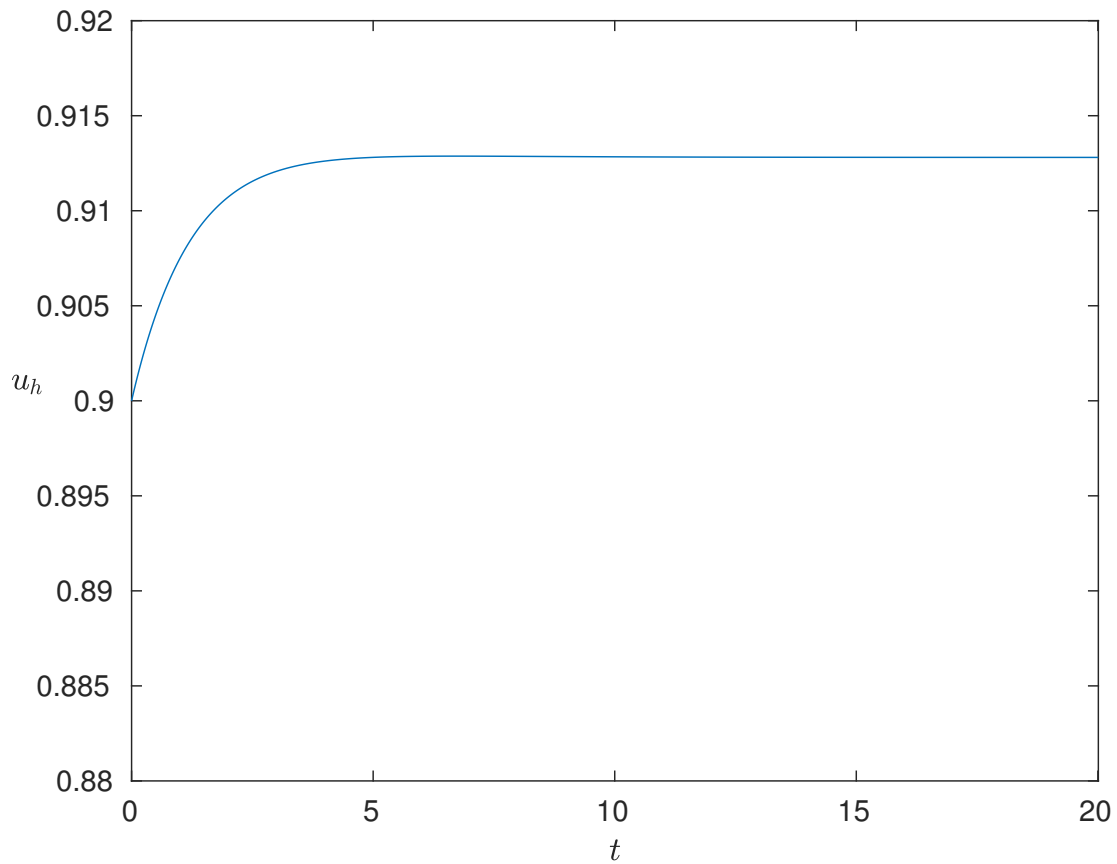


Figura 6.35: Ejemplo 3: Gráfico de u_h con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$.

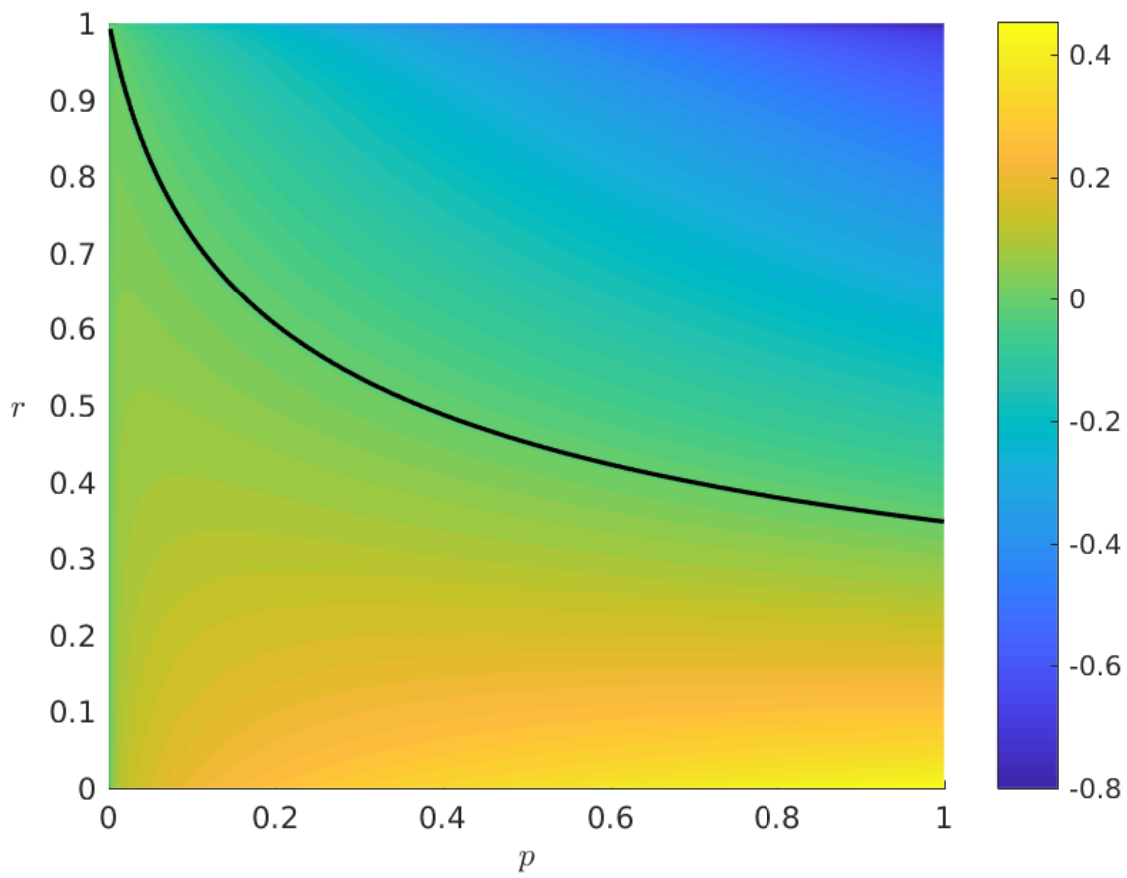


Figura 6.36: Ejemplo 3: Gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ con $k(p, r) = 0,5p^{1/3}(1 - r)^{1/3}$ y $l(p, r) = 0,8p^{2/3}r^{2/3}$, junto a la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$.

6.4. Ejemplo 4

Dado que f_h tiende a acumularse en el tiempo en la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$, surgió el interés por saber, por ejemplo, qué ocurre cuando $\mathcal{V}(u^\infty, p, \cdot)$ se anula en más de un punto, para un $p \in (0, P)$ fijo. Esto es posible de realizar cumpliendo todas las hipótesis pues ninguna exige, directa o indirectamente, que $\mathcal{V}(u, p, \cdot)$ sea monótona.

Se escoge, entonces, $P = 1$ y $T = 4,01$, con las tasas de adsorción y desorción

$$k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r), \quad l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r)),$$

y la distribución inicial

$$f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p).$$

Los parámetros utilizados son

$$u^{in} = 0,9$$

$$\rho = 1,$$

donde m es tal que

$$u^{in} + \int_0^P \int_0^1 r p f^{in}(p, r) dr dp = \rho.$$

Se calculó que $\Delta t \approx 4,9900 \times 10^{-4}$.

Las figuras 6.37, 6.38, 6.39, 6.40, 6.41, 6.42, 6.43, 6.44, 6.45 y 6.46 muestran a f_h para distintos tiempos y la figura 6.47 muestra a u_h .

En este ejemplo, si se compara el comportamiento asintótico de f_h con el gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ en la figura 6.48, se observa que f_h se acumula sólo en algunas partes de la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$, que corresponden a aquellas en donde además $\partial_r \mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) \leq 0$.

La interpretación que se le puede dar a este caso, de forma absolutamente intuitiva, es que el equilibrio sólo se da en $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$ cuando $\partial_r \mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) \leq 0$ debido a que si r aumenta cerca de esa zona, la tasa de sorción se hace negativa, por lo cual los iones se sueltan a una tasa más rápida de la que se acoplan, provocando que los iones acoplados r comiencen a disminuir. En cambio, si r disminuye cerca de esa zona, los iones se acoplan a una tasa más rápida de la que se sueltan, provocando que los iones acoplados r comiencen a aumentar. Dicho de otra forma, aquellos polímeros con configuraciones correspondientes a esa zona tienden a soltar iones más rápido cuando estos aumentan y a acoplar más rápido cuando disminuyen, aumentando entonces la cantidad de polímeros que acoplan y sueltan iones a la misma rapidez, explicando la acumulación de f_h .

Por otro lado, en las zonas en que $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$ y $\partial_r \mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) \geq 0$, si r aumenta entonces los polímeros con aquellas configuraciones tienden a acoplar iones más rápido. Si

t	$0 < r < 1/3$	$1/3 < r < 2/3$	$2/3 < r < 1$
0	11,11 %	48,15 %	40,74 %
0,05	7,24 %	53,18 %	39,58 %
0,1	5,56 %	54,58 %	39,86 %
0,15	4,83 %	54,97 %	40,20 %
0,2	4,51 %	55,09 %	40,40 %
0,3	4,32 %	55,13 %	40,55 %
0,5	4,26 %	55,14 %	40,60 %
1	4,25 %	55,13 %	40,61 %
2	4,25 %	55,13 %	40,61 %
4	4,25 %	55,13 %	40,61 %

Tabla 6.1: Ejemplo 4: Distribución (aproximada) de la masa $\int_{\mathcal{S}_P} rpf_h(t, p, r)drdp$, a través del tiempo, en las zonas de $\mathcal{S}_P$ donde se acumula f_h .

r disminuye, los polímeros tienden a soltar iones más rapido. Así, ningún polímero termina con configuraciones cercanas a dicha zona.

La tabla 6.1 muestra cómo se distribuye la masa $\int_{\mathcal{S}_P} rpf_h(t, p, r)drdp$ (cantidad de iones) en las regiones $0 < r < 1/3$, $1/3 < r < 2/3$ y $2/3 < r < 1$, que corresponden a regiones de $\mathcal{S}_P$ del mismo tamaño, donde cada una incluye una curva de acumulación de f_h . Los valores fueron calculados con la aproximación ya conocida

$$\int_{\mathcal{S}_P} rpf_h(t, p, r)drdp \approx \sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^I r_i p_j f_h(t, p_j, r_i) \Delta r \Delta p$$

y la tabla muestra, a su vez, valores aproximados de los porcentajes de la masa correspondiente a cada zona.

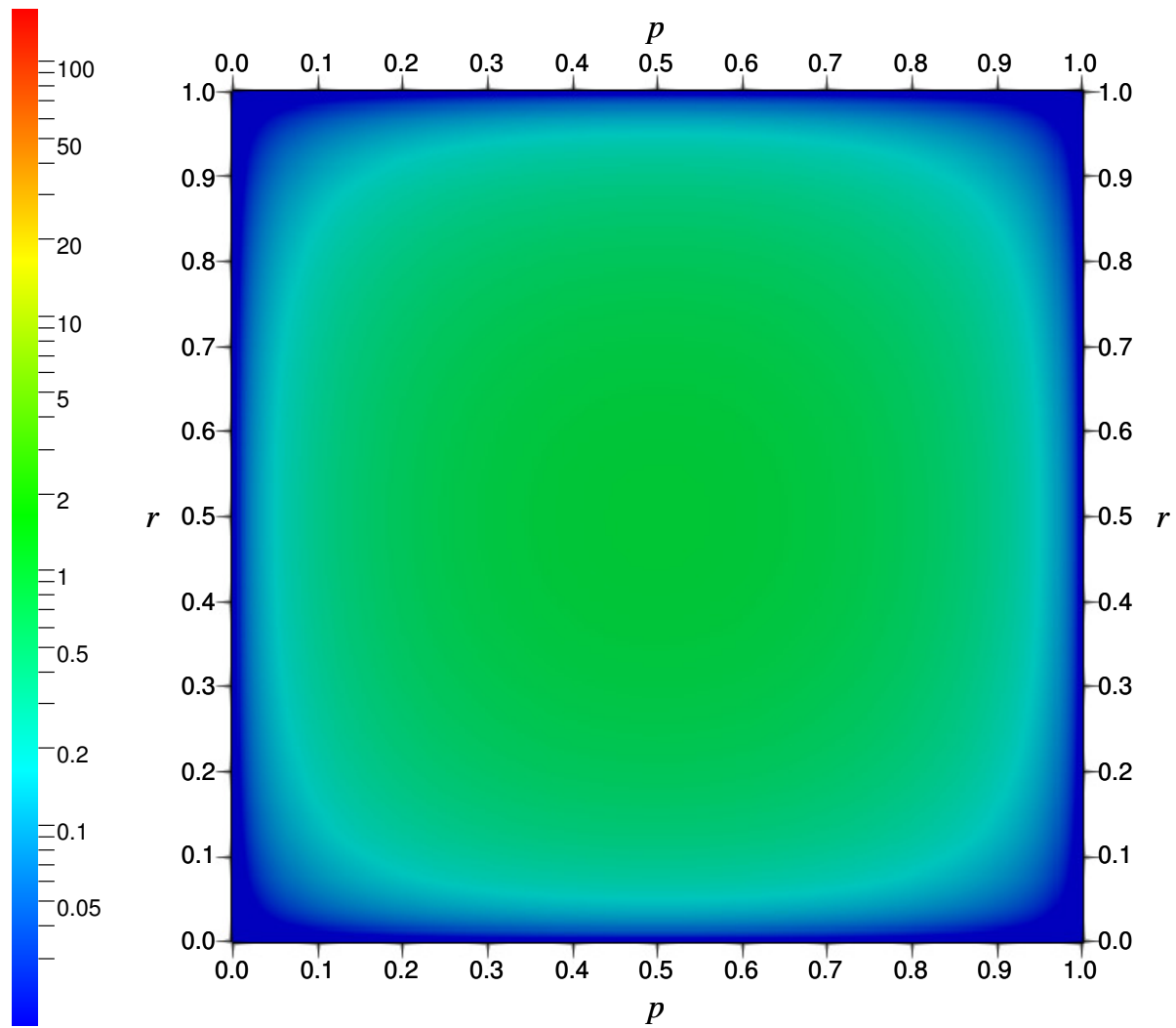


Figura 6.37: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t=0; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

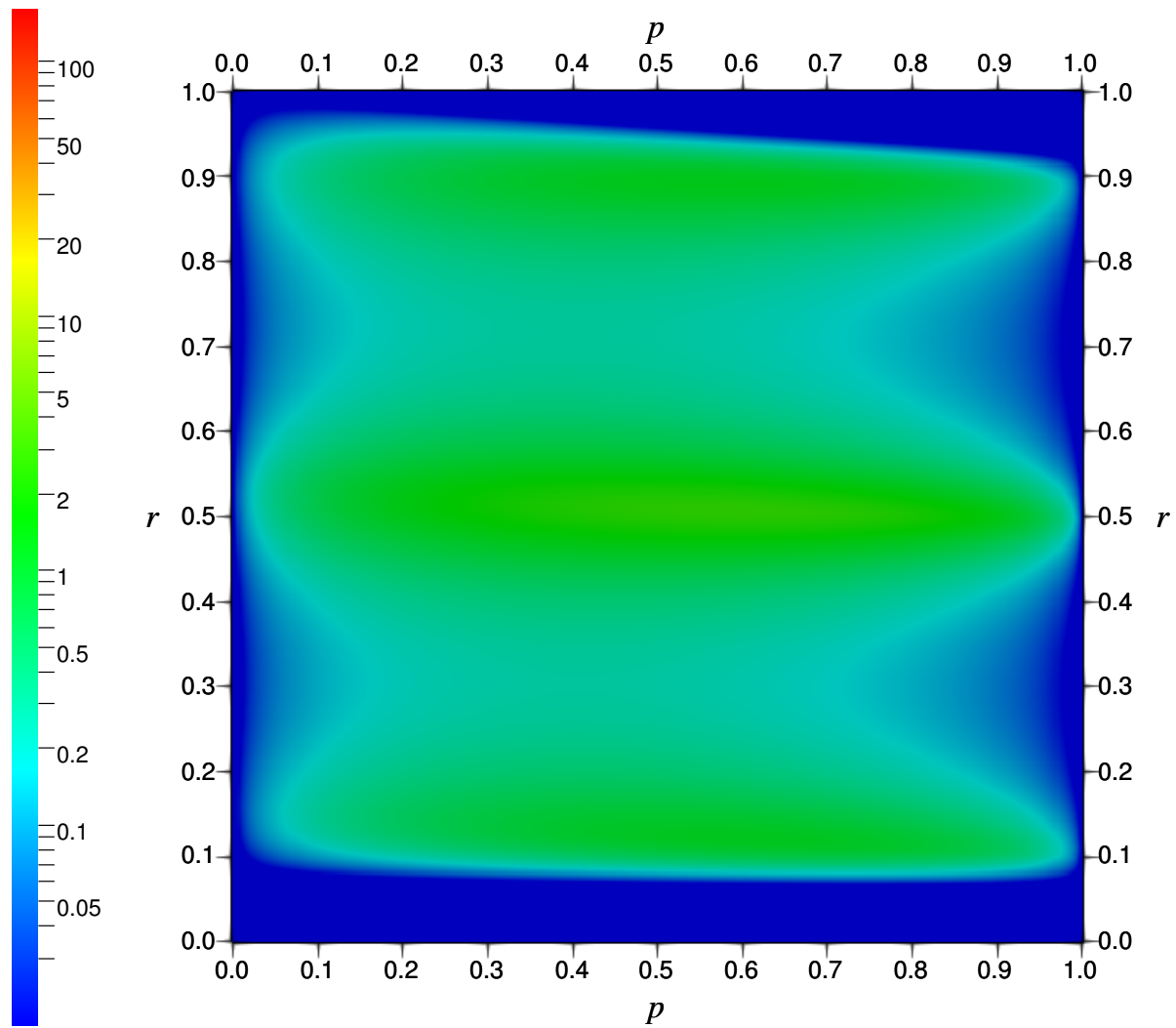


Figura 6.38: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,05; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

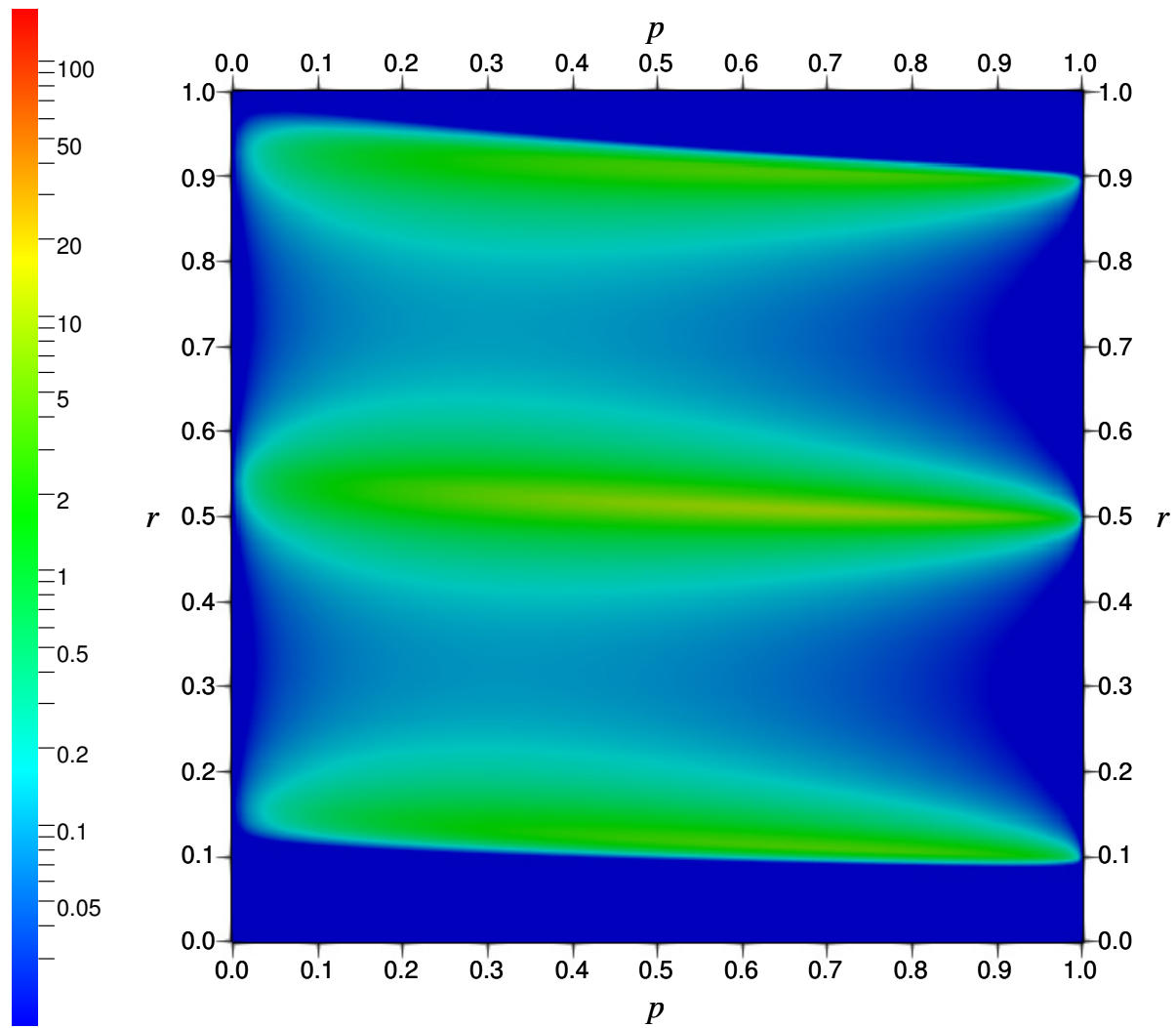


Figura 6.39: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0, 1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

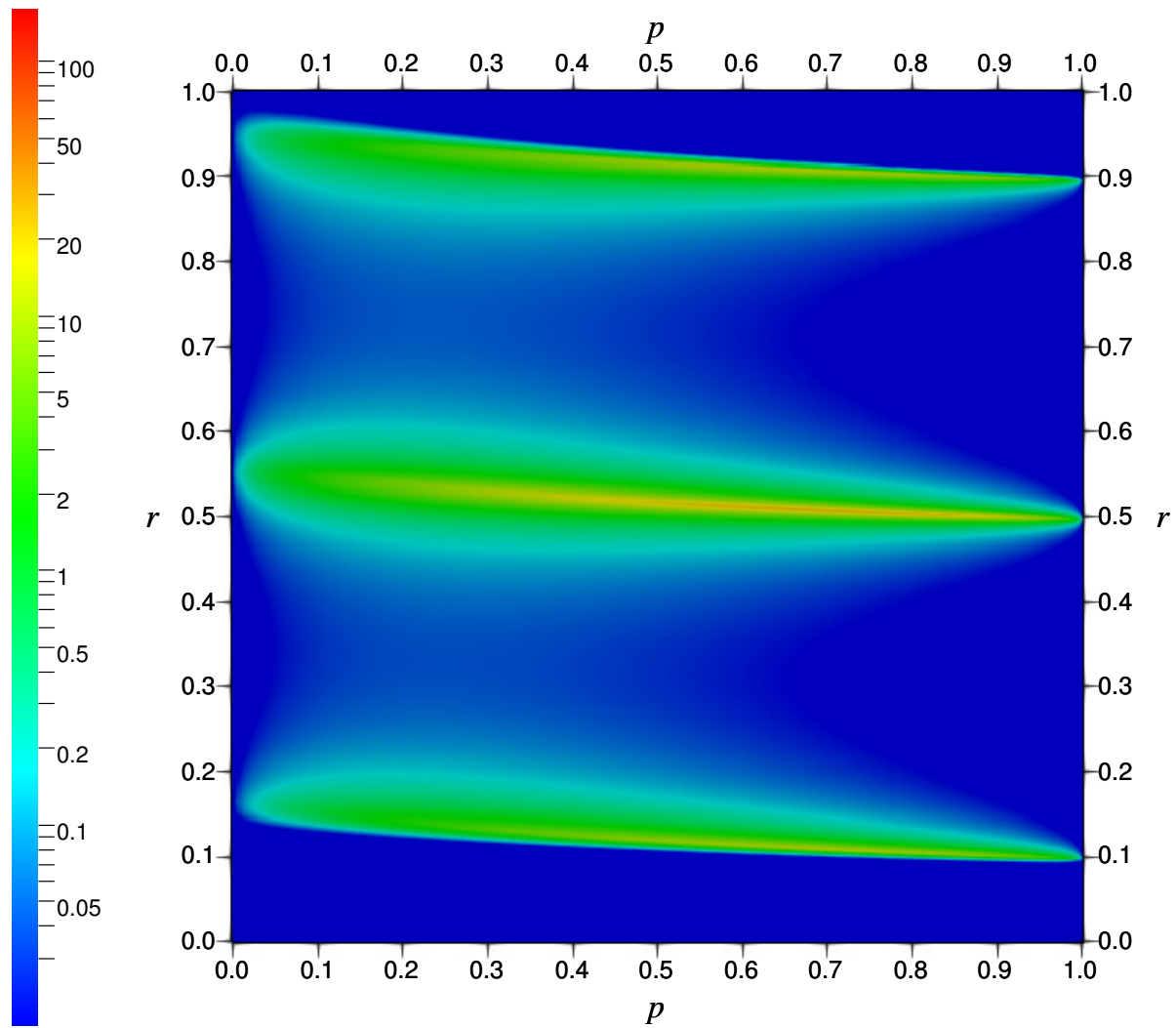


Figura 6.40: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,15; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

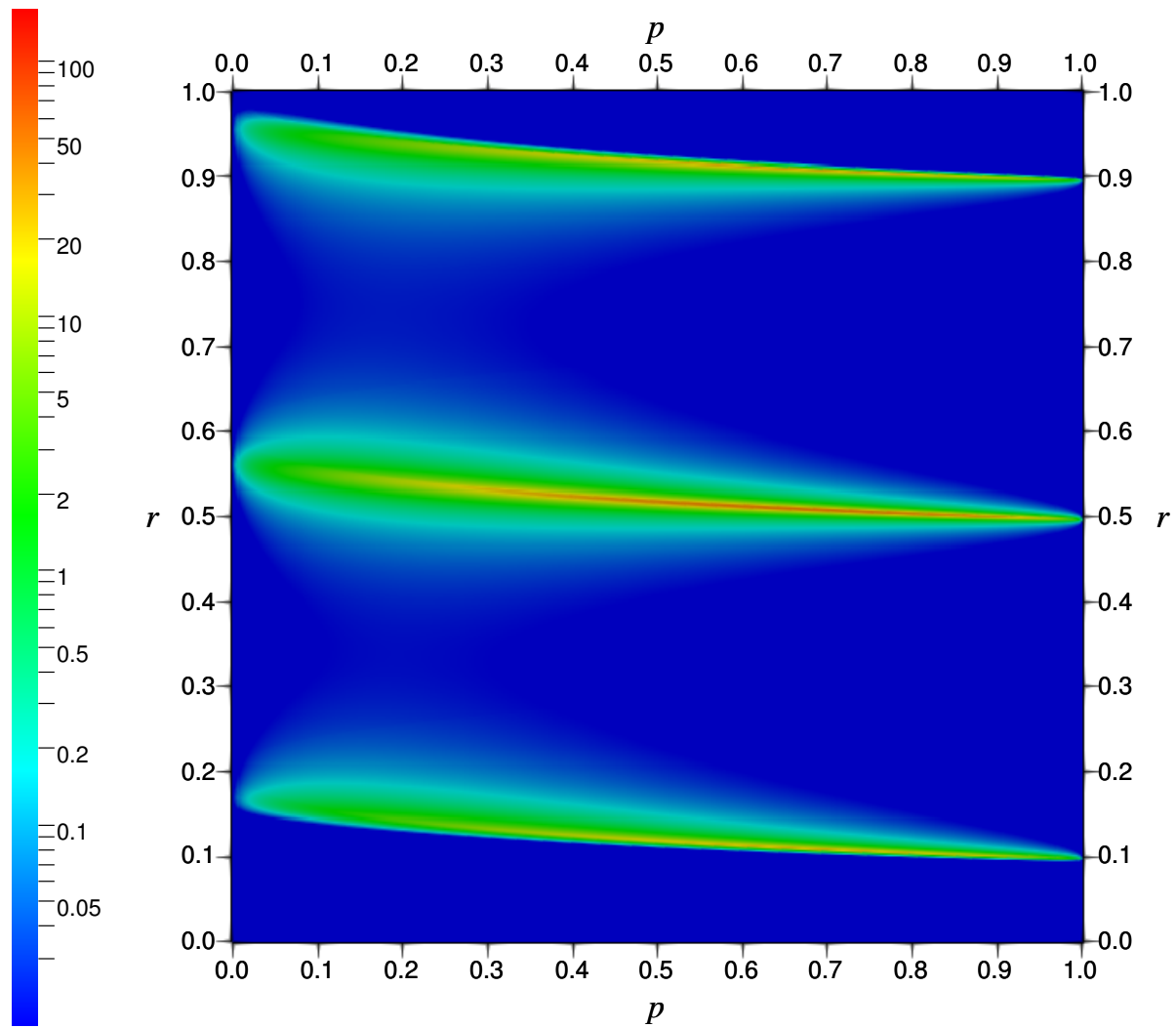


Figura 6.41: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

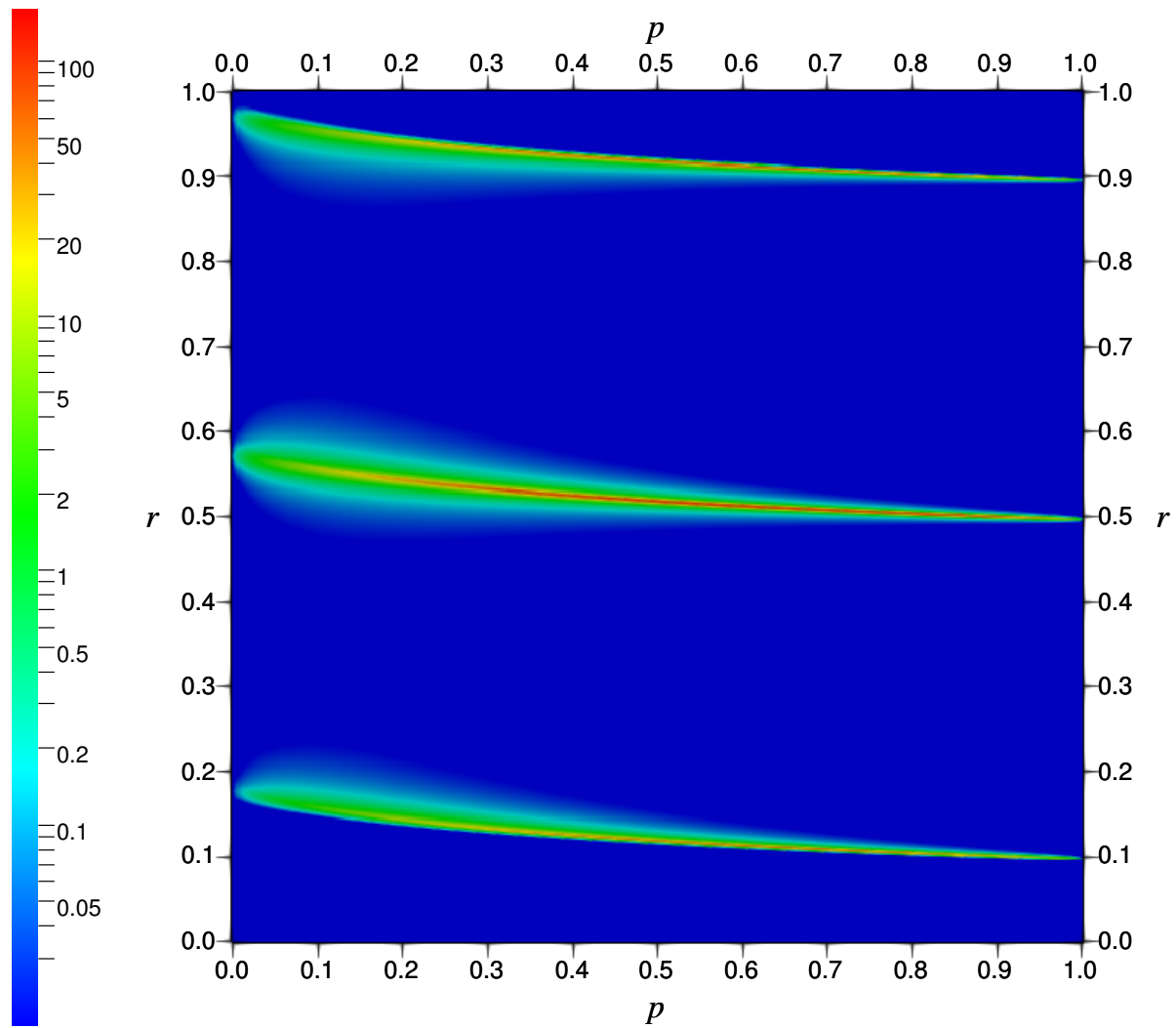


Figura 6.42: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,3; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

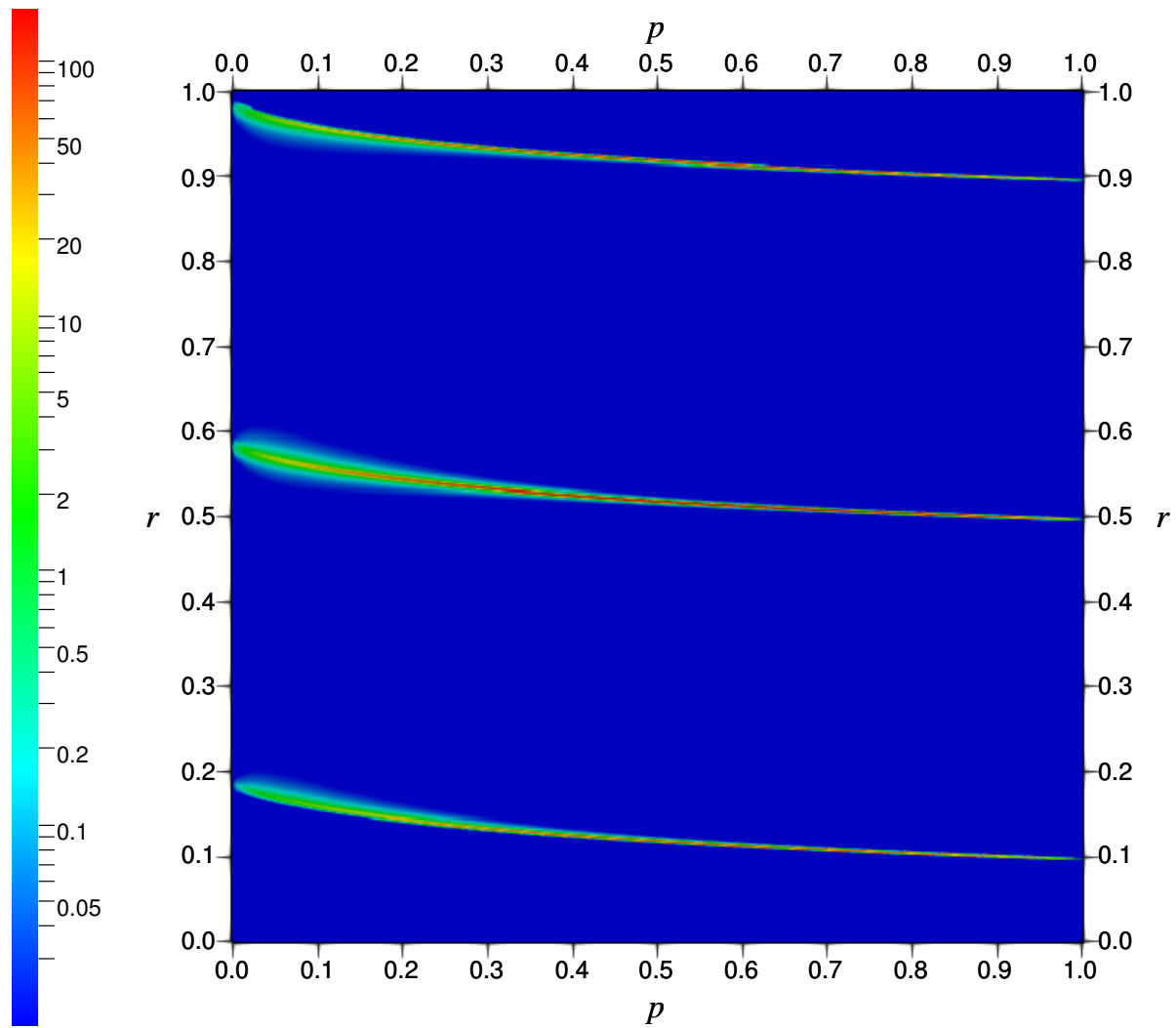


Figura 6.43: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 0,5; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

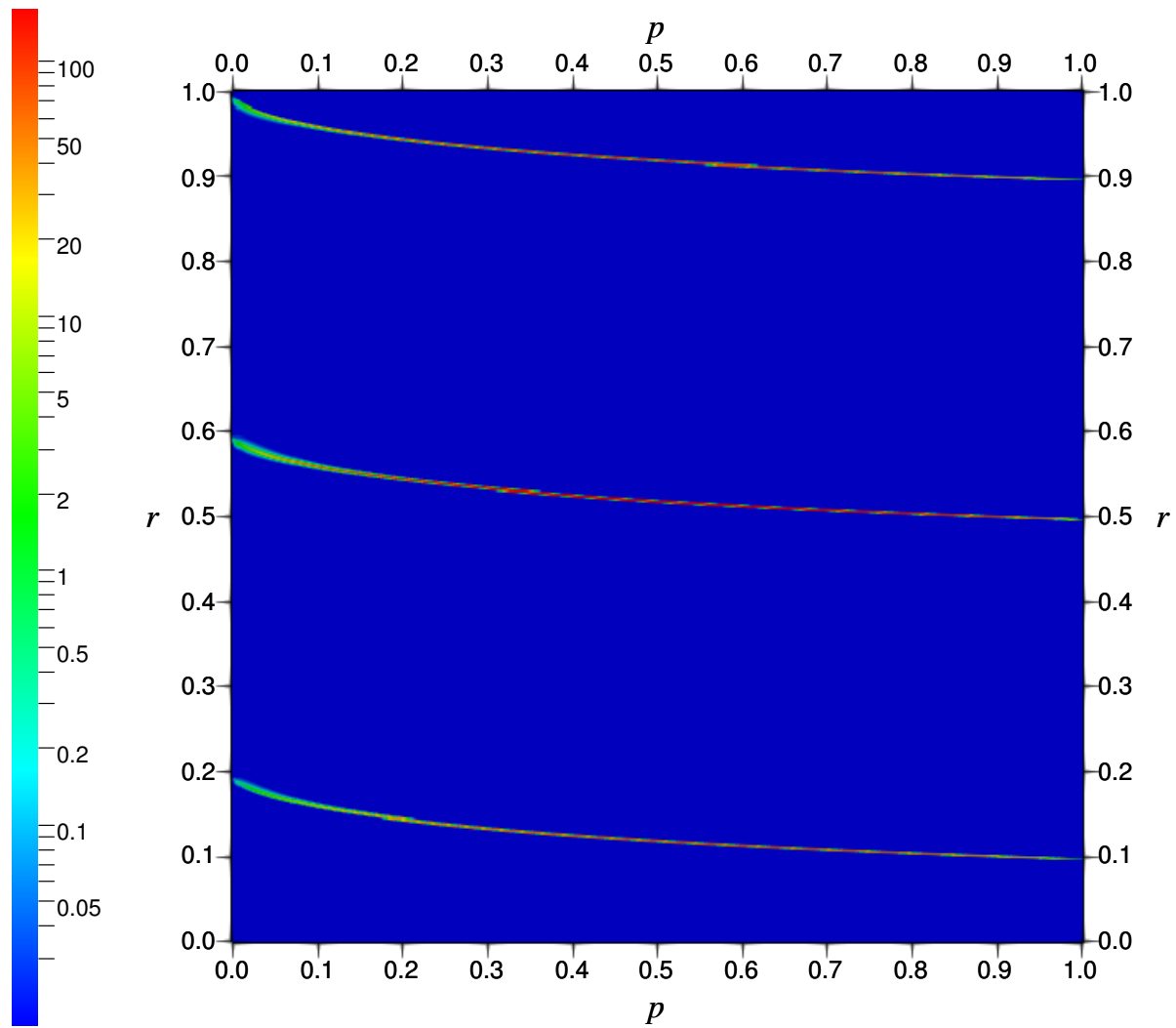


Figura 6.44: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t=1; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1-r)p(P-p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

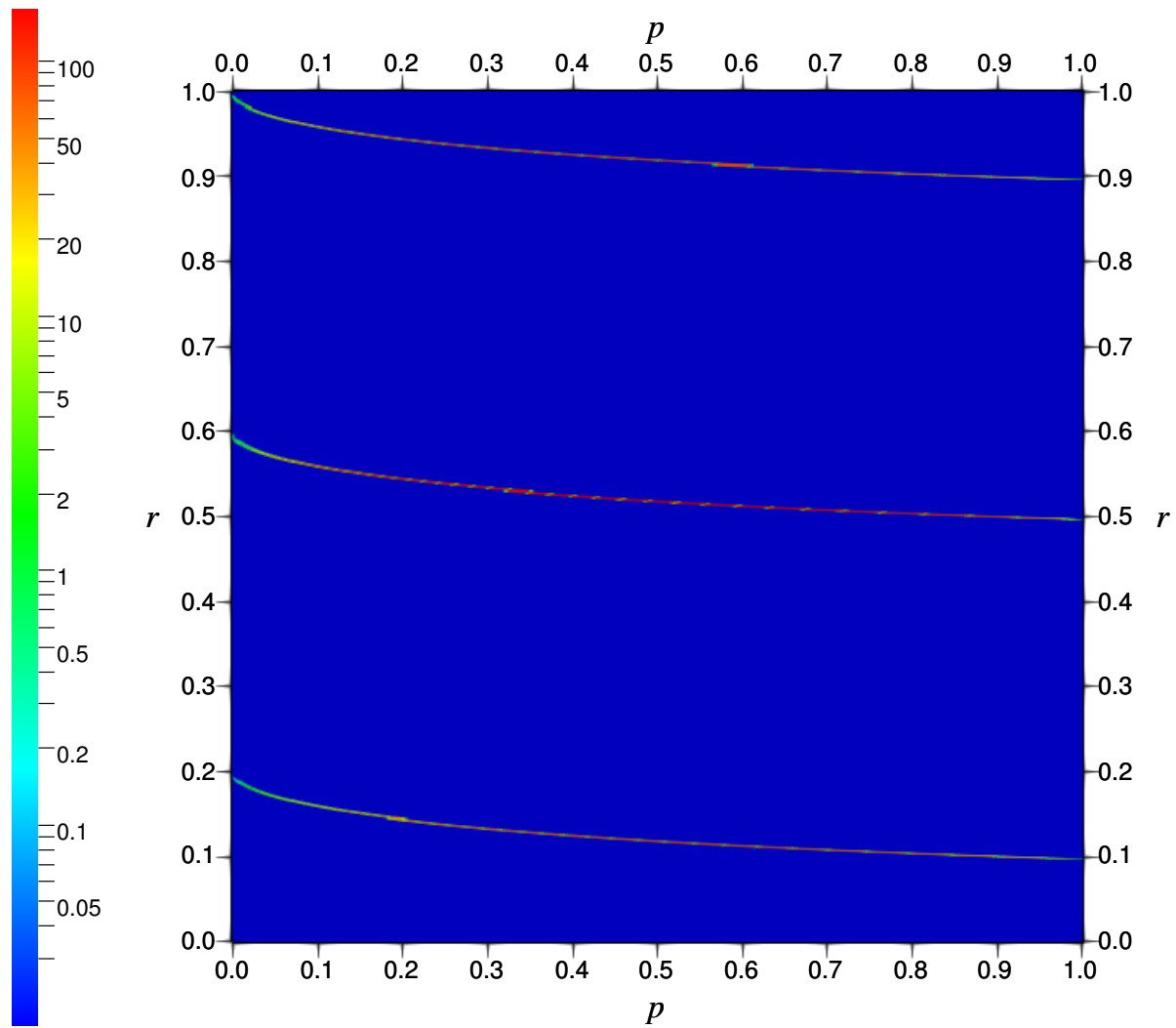


Figura 6.45: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 2; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

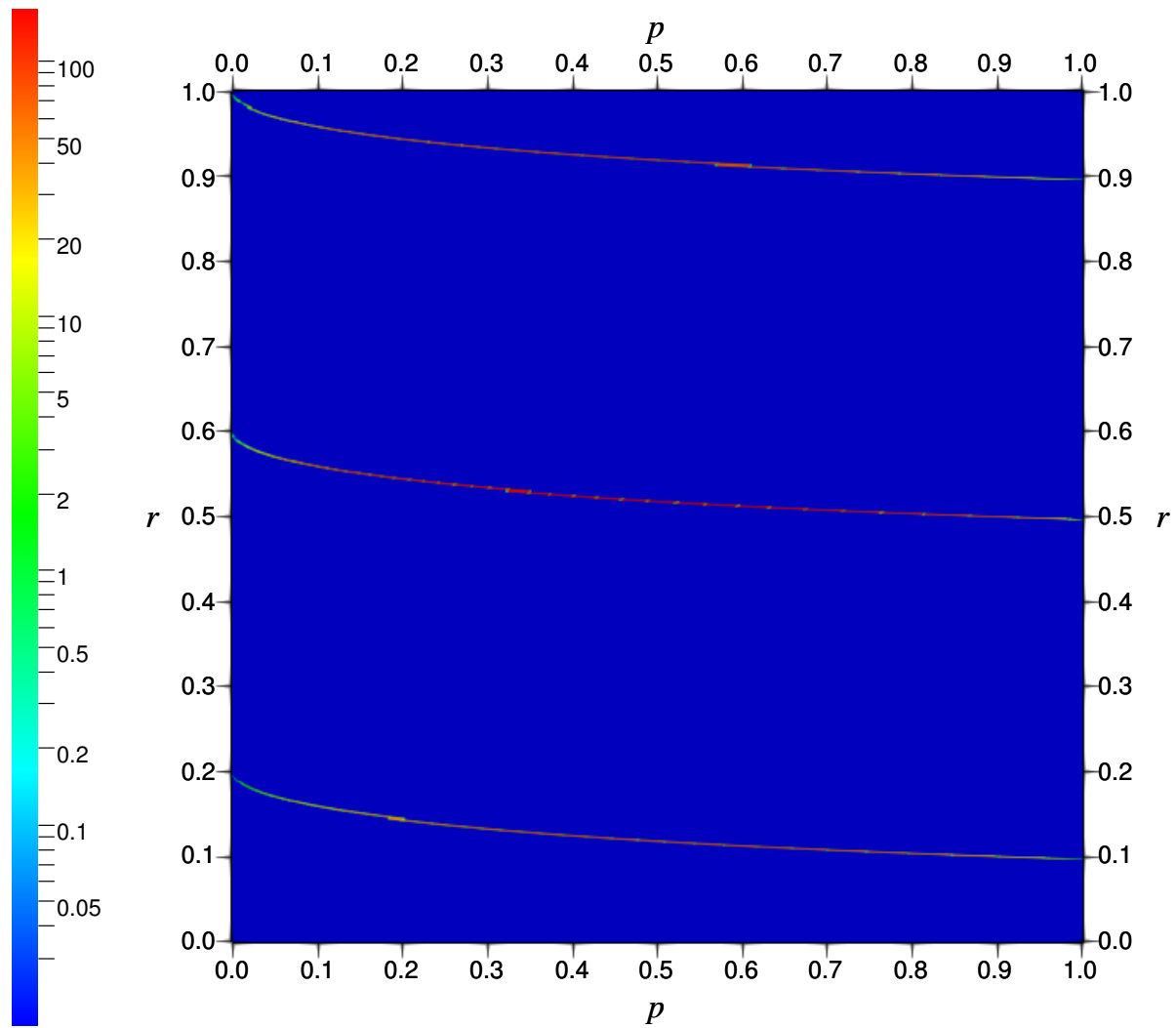


Figura 6.46: Ejemplo 4: Gráfico de $f_h(t = 4; \cdot, \cdot)$ con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

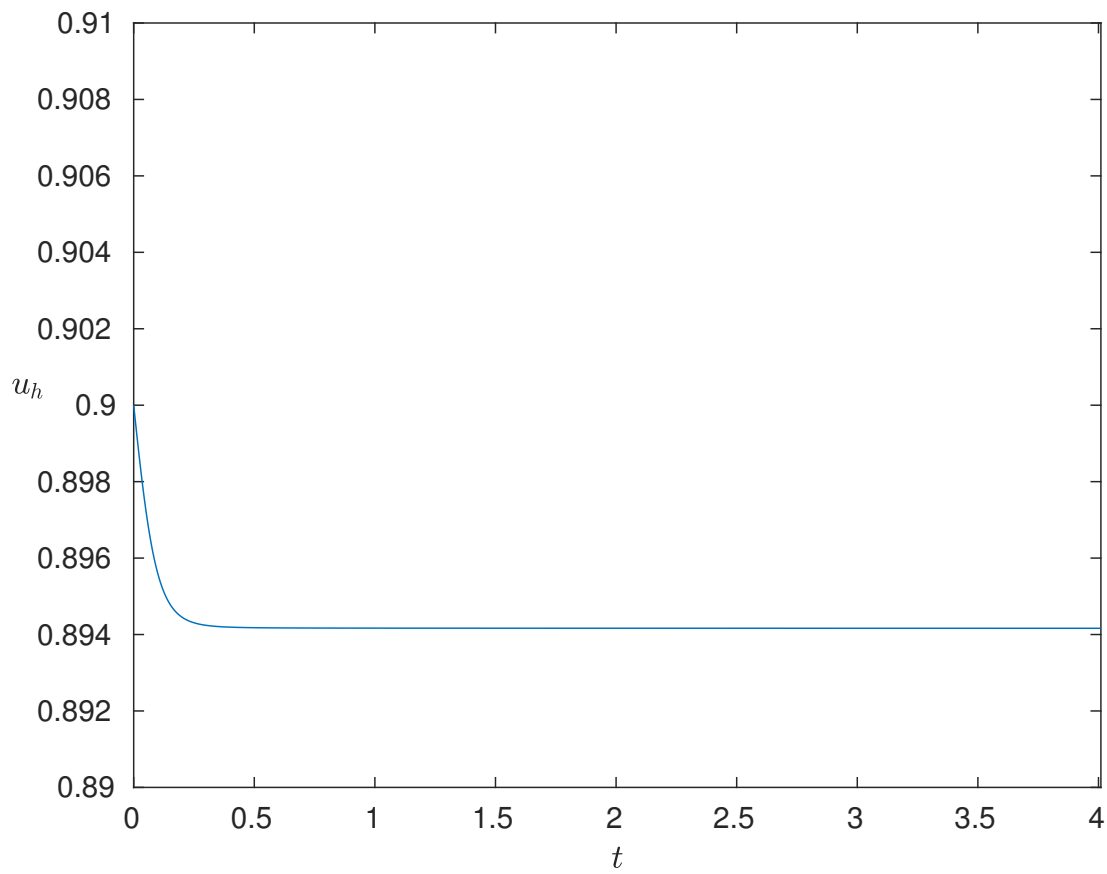


Figura 6.47: Ejemplo 4: Gráfico de u_h con $f^{in}(p, r) = m \cdot r(1 - r)p(P - p)$, $u^{in} = 0,9$ y tasas de sorción $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$.

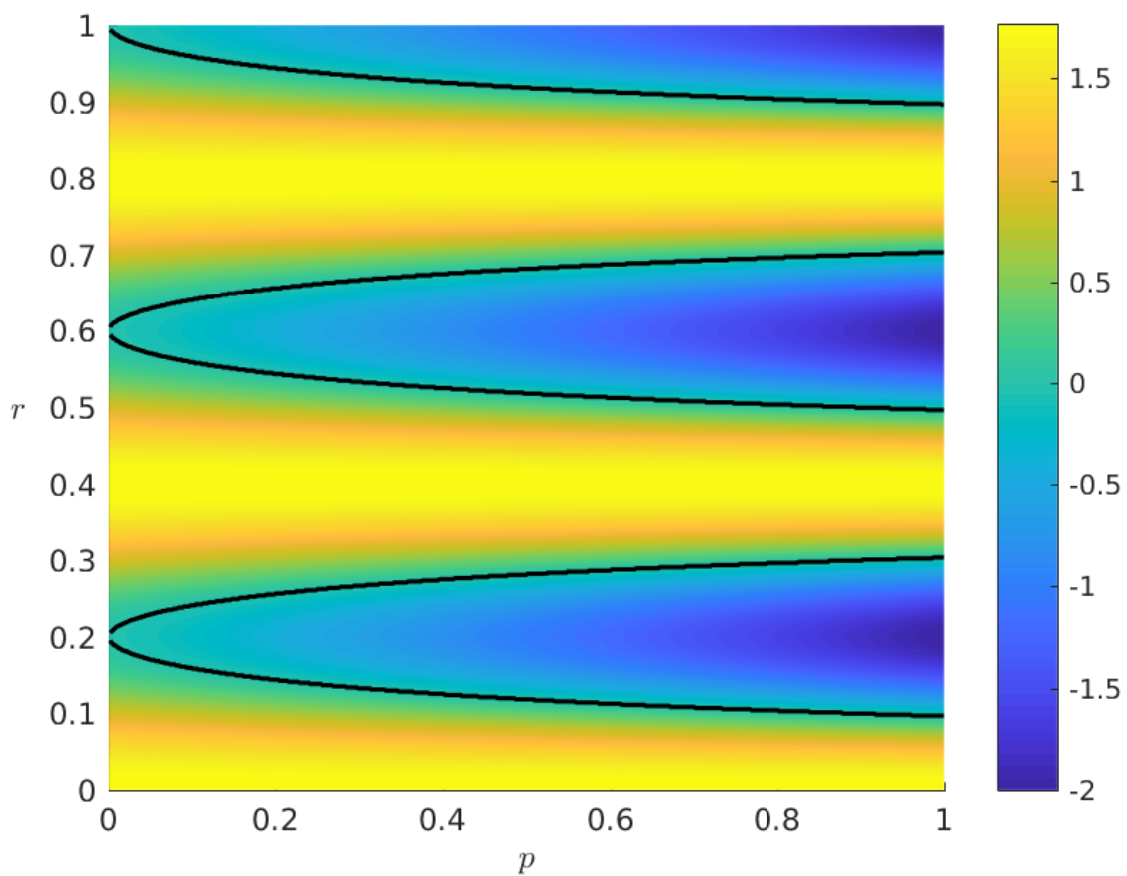


Figura 6.48: Ejemplo 4: Gráfico de $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot)$ con $k(p, r) = 1 + \cos(5\pi r)$ y $l(p, r) = p(1 - \cos(5\pi r))$, junto a la curva $\mathcal{V}(u^\infty, \cdot, \cdot) = 0$.

Conclusiones

En esta memoria se analizó un sistema de ecuaciones de tipo Lifshitz-Slyozov aplicado a un modelo de polímeros, proponiendo un esquema numérico que incluye al método de volúmenes finitos y demostrando su validez al garantizar que éste converge a la solución exacta del problema débil.

Si bien algo similar se realizó en (Hingant y Sepúlveda, 2015), el presente documento se enfoca en desarrollar la demostración utilizando el hecho de que el esquema es de variación acotada. Esto último fue tal vez la parte menos convencional, pues se puede encontrar una gran cantidad de documentos que demuestran resultados de variación acotada en una sola dimensión y no en forma bidimensional. Esto motivó al autor a argumentar, por idea propia, a través de estimaciones en cada dimensión que no tienen utilidad por separado, siendo eficaces sólo al combinarlas.

Otra diferencia con el mencionado estudio fue que se eliminó la condición de monotonía de la tasa de sorción, siendo útil para respaldar el ejemplo 4 donde se experimenta con una tasa de sorción que provoca más de una zona de equilibrio del fenómeno, desconociendo, a su vez, si esto puede existir en un caso real. Fue necesario, además, establecer una hipótesis más fuerte respecto de las tasas de adsorción y desorción, presentada como (H2).

Las hipótesis fueron planteadas para poder desarrollar la demostración del teorema que garantiza la convergencia del esquema numérico. Sin embargo, el ejemplo 3 sugiere que existen hipótesis que se pueden relajar, como (H2) en dicho caso, ya que los resultados mostraron en forma gráfica que el comportamiento es similar al resto de los ejemplos que sí satisfacen las hipótesis. Para poder desarrollar las demostraciones con hipótesis más relajadas se requieren otras herramientas que no están al alcance de este trabajo.

Los resultados experimentales mostraron el comportamiento asintótico de la función de distribución f , mostrando que ésta se acumula en la curva donde la tasa de sorción es nula. Esto coincide con la documentación existente sobre las ecuaciones de Lifshitz-Slyozov, por ejemplo (Filbet y Laurençot, 2003) y (Tine et al., 2013).

Cabe notar que los ejemplos fueron realizados con parámetros, condiciones iniciales y tasas de adsorción y desorción cuya consistencia con modelos reales no se investigó, siendo el ejemplo 4 el que podría estar más alejado de la realidad debido a la forma de la tasa de

sorción. Esto ocurrió debido a que el presente trabajo trata sobre la matemática presente en el fenómeno, estableciendo las hipótesis que se deberían considerar al probar modelos reales.

Si se observa la forma que tiene la función f a través del tiempo, los valores de ésta pierden relevancia en la mayor parte del dominio, siendo útiles sólo aquellos datos que representan puntos cercanos a la curva donde se anula la tasa de sorción. Por este motivo, si se exigiera mayor precisión en los resultados, una malla más fina provocaría un uso excesivo de memoria computacional con datos que en su mayoría son similares. Para solucionar esto, se pueden aplicar esquemas adaptativos que se encargan de refinar la malla sólo en aquellas zonas donde la pendiente de la función es muy elevada, es decir, generan más datos en las zonas más relevantes. Para más información al respecto, ver (Harten, 2010) y los trabajos (Bürger et al., 2008a) y (Bürger et al., 2008b).

Bibliografía

- BECKER, R. y DÖRING, W. Kinetische behandlung der keimbildung in übersättigten dämpfen. *Ann. Phys.*, vol. 24, páginas 719–752, 1935.
- BÜRGER, R., RUIZ, R., SCHNEIDER, K. y SEPÚLVEDA, M. Fully adaptive multiresolution schemes for strongly degenerate parabolic equations in one space dimension. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, vol. 42(4), páginas 535–563, 2008a.
- BÜRGER, R., RUIZ, R., SCHNEIDER, K. y SEPÚLVEDA, M. Fully adaptive multiresolution schemes for strongly degenerate parabolic equations with discontinuous flux. *Journal of Engineering Mathematics*, vol. 60(3-4), páginas 365–385, 2008b.
- COLLET, J.-F. y GOUDON, T. On solutions of the lifshitz-slyozov model. *Nonlinearty*, vol. 13(4), páginas 1239–1262, 2000.
- COLLET, J.-F., GOUDON, T., POUPAUD, F. y VASSEUR, A. The becker-döring system and its lifshitz-slyozov limit. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, vol. 62(5), páginas 1488–1500, 2002.
- EDWARDS, R. *Functional analysis: theory and applications*. Athena series. Holt, Rinehart and Winston, 1965.
- EVANS, L. C. *Partial Differential Equations*, vol. 19 de *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, segunda edición, 2010.
- FILBET, F. y LAURENÇOT, P. Numerical approximation of the lifshitz-slyozov-wagner equation. *SIAM Jorunal on Numerical Analysis*, vol. 41(2), páginas 263–588, 2003.
- FLANAGAN, S. V., JOHNSTON, R. B. y ZHENG, Y. Arsenic in tube well water in bangladesh: health and economic impacts and implications for arsenic mitigation. *Bulletin of the World Health Organization*, vol. 90(11), páginas 839–46, 2012.
- GODLEWSKI, E. y RAVIART, P.-A. *Hyperbolic Systems of Conservation Laws*. Mathematiques Applications. Ellipses, 1991.
- GODLEWSKI, E. y RAVIART, P.-A. *Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws*. Número 118 en *Applied Mathematical Sciences*. Springer, 1996.

- HARTEN, A. Multiresolution algorithms for the numerical solution of hyperbolic conservation laws. vol. 48, páginas 1305–1342, 2010.
- HINGANT, E. y SEPÚLVEDA, M. Derivation and mathematical study of a sorption-coagulation equation. *Nonlinearity*, vol. 28(10), páginas 3623–3661, 2015.
- JOHNSTON, R. y HEIJNEN, H. Safe water technology for arsenic removal. *Technologies for arsenic removal from drinking water*, páginas 1–22, 2001.
- LEVEQUE, R. J. *Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge, 2002.
- LIFSHITZ, I. M. y SLYOZOV, V. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solution. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 19(1-2), páginas 35–50, 1961.
- MARSH, H. y RODRÍGUEZ-REINOSO, F. *Activated Carbon*. Elsevier, 2006.
- MCCRUM, N. G., BUCKLEY, C. P. y BUCKNALL, C. B. *Principles of Polymer Engineering*. Oxford University Press, segunda edición, 1997.
- MELOAN, C. E. *Chemical Separations. Principles, Techniques and Experiments*. Techniques in Analytical Chemistry. John Wiley & Sons, Inc., 1999.
- OXFORD. *A Dictionary of Chemistry*. Oxford University Press, sexta edición, 2008.
- RIVAS, B. L., PEREIRA, E. D., MORENO-VILLOSLADA, I. y SÁNCHEZ, J. Water-soluble functional polymers in conjunction with membranes to remove pollutant ions from aqueous solutions. *Progress in Polymer Science*, vol. 36(2), páginas 294–322, 2011.
- RIVAS, B. L., ULLOA, E. D. P. y MORENO-VILLOSLADA, I. Water-soluble polymer-metal ion interactions. *Progress in Polymer Science*, vol. 28(2), páginas 173–208, 2003.
- RIVAS, B. L., ULLOA, E. D. P. y MORENO-VILLOSLADA, I. Highlights on the use of diafiltration in the characterization of the low molecular-weight species-water-soluble polymer interactions. *Frontal polymer research*, 2006.
- RUTHVEN, D. M., FAROOQ, S. y KNAEBEL, K. S. *Pressure Swing Adsorption*. VCH Publishers, Inc., 1994.
- SANCHA, A. M. Review of coagulation technology for removal of arsenic: Case of Chile. *Journal of Health Population and Nutrition*, vol. 24(3), páginas 267–272, 2006.
- TINE, L. M., GOUDON, T. y LAGOUTIÈRE, F. Simulations of the lifshitz-slyozov equations: the role of the coagulations terms in the asymptotic behavior. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, vol. 23(07), páginas 1177–1215, 2013.
- VRABIE, I. *Compactness Methods for Nonlinear Evolutions*, vol. 75 de *Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics*. Taylor & Francis, 1995.

- WANG, L. K., CHEN, J. P., HUNG, Y.-T. y SHAMMAS, N. K. *Heavy metals in the Environment*. Advances in Industrial and Hazardous Wastes Treatment Series. CRC Press, Taylor & Francis Group, 2009.
- WORLD HEALTH ORGANIZATION. Guidelines for drinking-water quality. 2001.
- WORLD HEALTH ORGANIZATION. *Arsenic in drinking water*. Geneva: World Health Organization, 2002.
- YVINEC, R., DESCHAMPS, J. y HINGANT, E. From becker-döring to lifshitz-slyozov: deriving the non-local boundary condition of a non-linear transport equation. *ITM Web of Conferences*, vol. 5(00017), 2015.
- ZAGORODNI, A. A. *Ion-Exchange Materials, Properties and Applications*. Royal Institute of Technology, 2007.
- ZIEMER, W. P. *Weakly Differentiable Functions: Sobolev Spaces and Functions of Bounded Variation*, vol. 120 de *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag New York, 1989.