Synergismus Scyentifica UTFPR

# XIII ERMAC

# Mini Curso

# Controle Ótimo Localizado Usando Equações Diferenciais Parciais

Santina de Fátima Arantes

Coordenação de Matemática Aplicada - CMA

Pós-Doutorado

Laboratório Nacional de Computação Científica Petrópolis, setembro de 2009

# Sumário

1	Controle Ótimo: Parte Teórica					
Introdução						
	1.1	Introdução e Motivação	1			
	1.2	Resultados Preliminares	2			
	1.3	Formulação do Problema	2			
		1.3.1 Definição do Funcional de Custo	3			
	1.4	1.4 Existência e Unicidade de Solução do Sistema de Estado				
	1.5	5 Existência e Unicidade do Controle Ótimo				
		1.5.1 Definição do Espaço de Controles ${\mathfrak U}$	5			
		1.5.2 Definição do Subconjunto Admissível $\mathcal{U}_{ad}$ de $\mathcal{U}$	6			
		1.5.3 Propriedades do Funcional de Custo $J$	6			
	1.6	1.6 Caracterização do Controle Ótimo				
		1.6.1 Estado Adjunto	8			
		1.6.2 Sistema de Otimalidade	9			
	1.7	Aproximação e Convergência Numérica	9			
<b>2</b>	Cor	Controle Ótimo: Parte Numérica				
	2.1	Solução Numérica	11			
		2.1.1 Formulação Variacional	11			
		2.1.2 O Problema Aproximado Via Elementos Finitos	12			

Synergismus Scyentifica UTFPR	$04~(2)\cdot 2009$	iii			
2.1.3 O Problema Semidi	iscreto	12			
2.1.4 O Problema Totalm	nente Discretizado	13			
2.1.5 Algoritmo de Resolu	lução	14			
2.2 Aplicações		15			
2.2.1 Resultados Comput	tacionais	15			
2.2.2 Conclusão		23			
Referências Bibliográficas 2					

# Capítulo 1

# Controle Ótimo: Parte Teórica

## 1.1 Introdução e Motivação

Um problema de controle ótimo é um modelo matemático dinâmico que através de um sistema de equações algébricas e/ou diferenciais descreve um certo fenômeno ou processo, que necessita ser controlado da melhor maneira possível. Em outras palavras, controle ótimo é basicamente um mecanismo pelo qual um sistema, por exemplo mecânico, elétrico, financeiro ou biológico é utilizado para manter o equilíbrio.

A solução ótima de um problema deste tipo consiste na determinação dos perfis de variáveis de controle que minimizam uma medida de desempenho. A solução de problemas de controle ótimo é um ramo do conhecimento de grande importância para as várias áreas da ciência, como por exemplo, engenharias, física, matemática, ecologia, etc, pois estuda formas de se controlar as variáveis de um determinado problema de modo a conseguir sua melhor solução, ou seja, a solução ótima.

O problema de controle ótimo consiste de um sistema de estado associado a um funcional de custo que depende da solução do sistema de estado no tempo final T e do controle que chamaremos de v. Os controles  $v_1, v_2, v_3...$  etc., são dados em um subconjunto convexo fechado  $\mathcal{U}_{ad}$  de um subespaçoo  $\mathcal{U}$  de  $L^2(0, T)$ .

O objetivo é escolher um controle que minimize o funcional de custo sobre um conjunto de controles admissíveis.

A metodologia usada permite obter de forma explícita o controle ótimo e a partir daí chegar ao sistema de otimalidade que é o que permite o cálculo numérico do problema.

## 1.2 Resultados Preliminares

- Espaços Funcionais e Resultados Básicos: Espacos L<sup>p</sup>, Desigualdade de Young, Desigualdade de Holder, Teorema de Representação de Riesz-Frechet, Espaço das Distribuições, Espaços de Sobolev, Desigualdade de Poincaré, Teoremas de Imersões de Sobolev e Espaços Funcionais Vetoriais.
- Método Direto do Cálculo de Variações: Convergência Fraca e o seguinte Teorema.

**Teorema 1.1.** Seja um funcional  $v \mapsto J(v)$ , contínuo e convexo definido sobre  $\mathcal{U}_{ad} \subset \mathcal{U}$ com valores em  $\mathbb{R}$  e suponha que

 $\mathfrak{U} \notin um \ espaço \ de \ Hilbert \ sobre \ \mathbb{R}.$ 

 $\mathbb{U}_{ad}$  é convexo e fechado em  $\mathbb{U}$ .

Considere o problema: encontrar  $u \in U_{ad}$ , tal que

$$J(u) = \inf J(v), \ v \in \mathcal{U}_{ad}.$$

Assim

1. Se J for coercivo, i.e., se

$$\|v\|_{\mathcal{U}} \to \infty \ \Rightarrow \ J(v) \to \infty, \ \forall \ v \in \mathfrak{U}_{ad}.$$

Então existe  $u \in \mathcal{U}_{ad}$  tal que

$$J(u) \le J(v), \quad \forall v \in \mathcal{U}_{ad}.$$
(1.1)

2. Se J é estritamente convexo, i.e., se

$$J((1 - \theta)u + \theta v) < (1 - \theta)J(u) + \theta J(v), \ 0 < \theta < 1, \ u \neq v.$$

Então, existe no máximo um  $u \in U_{ad}$  satisfazendo (1.1).

## 1.3 Formulação do Problema

Seja $\Omega$ um subconjunto aberto limitado bem regular do  $R^n$  eT>0dado. O modelo é dado pelo sistema de estado

$$\frac{\partial y}{\partial t} - \lambda \Delta y + \beta \cdot \nabla y = F(x, t) \qquad \text{em} \quad \Omega \times (0, T) \tag{1.2}$$

$$y(x,0) = 0 \qquad \text{em } \Omega \tag{1.3}$$

$$y(x,t) = 0$$
 sobre  $\partial \Omega \times (0,T)$ . (1.4)

Na primeira equação, o primeiro termo é chamado transiente e y(x,t) representa a taxa de variação de alguma substância em relação ao tempo; o segundo termo é chamado difusivo e  $\lambda$  representa o coeficiente de difusão; o terceiro termo é chamado convectivo e  $\beta$  representa o vetor velocidade com  $\beta_i \in C^1(\overline{\Omega})$  e F(x,t) é a fonte externa.

Estudamos o caso quando o controle  $v \in L^2(0,T)$  está inserido na fonte externa F(x,t), no caso em que o controle é localizado, a fonte externa é dada por  $F(x,t) = v(t)\phi(x)$ , onde  $\phi \in L^2(\Omega)$ é uma função com suporte compacto em  $\omega \subset \Omega$ .

A solução y depende do controle v, e esta dependência denota-se por y(x,t) = y(x,t;v).

A condição (1.3) diz que no instante inicial a solução do problema é nula. A condição (1.4) significa que, em qualquer tempo  $t \in (0, T)$ , a solução do problema é nula na fronteira  $\Omega$ .

**Observação 1:** Este é um problema, no qual o controle v está concentrado sobre os pontos internos de  $\Omega$ . Há casos em que o controle é feito na fronteira ou nos dados iniciais; estes casos não trataremos aqui.

**Observação 2:** No caso em que o controle é pontual, a fonte externa é dada por  $F(x,t) = v(t)\delta(x-b)$ , onde  $b \in \Omega$  e  $\delta(x-b)$  é o delta de Dirac no ponto b. Neste caso, obtemos os mesmos resultados quando consideramos o controle localizado, mas de forma mais trabalhosa e precisamos de mais regularidade para o problema; estes casos também não trataremos aqui.

#### 1.3.1 Definição do Funcional de Custo

Suponhamos que exista uma função que chamaremos de  $z_d$  que defina um padrão "aceitável" de alguma substância, e que estamos interessados em observar o estado y só no tempo final T. Nosso objetivo é escolher um controle v que minimize a diferença  $y(x,T;v) - z_d$  sobre um conjunto de controles admissíveis. Sobre cada controle v, é exercido algum custo; assim, o problema de controle ótimo é minimizar "erro mais custo". Com este propósito, definimos a função de custo

$$J: L^{2}(0,T) \to \mathbb{R} \text{ dada por (erro mais o custo)}$$
$$J(v) = \int_{\Omega} |y(x,T;v) - z_{d}|^{2} dx + N \int_{0}^{T} |v|^{2} dt.$$
(1.5)

O segundo termo do lado direito garante a coercividade do funcional de custo  $J \in N > 0$  é chamada constante de custo. Note que para J estar bem definido, precisamos que  $z_d \in L_2(\Omega)$ . Se  $\mathcal{U}_{ad} \subset L^2(0,T)$  é um subconjunto convexo e fechado, basicamente o problema de controle ótimo consiste em resolver dois problemas. • (P1) Encontrar um único  $u \in \mathcal{U}_{ad}$ , tal que

$$J(u) = \inf \left\{ J(v); v \in \mathcal{U}_{ad} \right\}.$$

Tal u é chamado de **controle ótimo.** 

• (P2) Caracterizar o controle ótimo de tal forma que seja possível o cálculo numérico do problema.

Para resolver os problemas (P1) e (P2), devemos seguir a seguintes etapas:

- Mostrar que o sistema de estado dado por (1.2)-(1.4) possui uma única solução.
- Mostrar que existe um único controle ótimo que minimize o funcional J sobre um conjunto de funções admissíveis U<sub>ad</sub>. Sendo isto o aspecto mais importante do ponto de vista matemático.
- Obter uma caracterização do controle ótimo e desta caracterização obter o sistema de otimalidade que permita o cálculo numérico do problema. Do ponto de vista numérico, esta caracterização é o aspecto mais importante.
- Aplicar o problema de Controle Ótimo e encontrar uma solução numérica do problema, usando o método de elementos finitos.
- Graficar a solução numérica.

### 1.4 Existência e Unicidade de Solução do Sistema de Estado

 $\operatorname{Consideremos}$ 

$$V = H_0^1(\Omega).$$

A aplicação  $v \to \|v\|$  de V em  $\mathbb R$  dada por

$$\|v\| = \left(\sum_{i=1}^{n} \int_{\Omega} \left|\frac{\partial v}{\partial x_{i}}\right|^{2} dx\right)^{\frac{1}{2}}$$

define uma norma em V.

Usando métodos padrões para Equações Diferenciais Parciais Parabólicas não é difícil mostrar que existe um único y solução forte de (1.2)-(1.4), tal que

$$y \in L^2(0,T; H^2(\Omega) \cap V) \cap C^0(0,T;V)$$
 e  $\frac{\partial y}{\partial t} \in L^2(0,T; L^2(\Omega)).$ 

Disto, segue que a aplicação

$$t \to y(t) = y(t; v)$$
 é contínua de  $[0, T] \to L^2(\Omega)$ .

Portanto,  $y(\cdot, T; v) \in L^2(\Omega)$ . E assim, para cada *controle*  $v \in L^2(0, T)$ , existe um único estado correspondente y.

**Lema 1.2.** Seja  $v \in L^2(0,T)$ . Então, a única solução y(x,t;v) do sistema (1.2)-(1.4) é uma aplicação afim em v; isto é,

$$v \longrightarrow y(x,t;v) - y(x,t;0)$$

é uma aplicação linear em v.

## 1.5 Existência e Unicidade do Controle Ótimo

Para garantir a existência e unicidade do Controle Ótimo, precisamos definir o espaço  $\mathcal{U}$  das funções de controle, um subconjunto admissível  $\mathcal{U}_{ad}$  de  $\mathcal{U}$  e verificar quais propriedades o funcional de custo J satisfaz sobre  $\mathcal{U}_{ad}$ .

#### 1.5.1 Definição do Espaço de Controles $\mathcal{U}$

Vimos que se  $v \in L^2(0,T)$ , então  $y(\cdot,T;v) \in L^2(\Omega)$  e portanto, o funcional de custo dado em (1.5) está bem definido para elementos em  $L^2(0,T)$ . Logo, definimos o espaço  $\mathcal{U}$  das funções de controle como

$$\mathcal{U} = L^2(0,T)$$

munido da norma

$$\|v\|_{\mathcal{U}} = \left(\int_0^T |v|^2 dt + \int_{\Omega} |y(x,T;v)|^2 dx\right)^{1/2}.$$

#### Propriedades do Espaço $\mathcal{U}$

- $\bullet~\mathcal{U}\,$ munido da norma acima é um Espaço de Hilbert.
- $\mathcal{U}$  não depende de  $\Omega$ .
- U não depende das condições de fronteiras.
- $C_0^{\infty}(0,T) \subset \mathcal{U}.$

• O espaço  $\mathcal{D}(0,T)$  é denso em  $\mathcal{U}$ . Portanto, se  $\mathcal{U}'$  denota o espaço dual de  $\mathcal{U}$ , então

$$\mathcal{D}(0,T) \subset \mathcal{U} \subset L^2(0,T) \subset \mathcal{U}' \subset \mathcal{D}'(0,T).$$

#### 1.5.2 Definição do Subconjunto Admissível $U_{ad}$ de U

A fim de resolver o problema (P1), consideramos subconjuntos convexos e fechados de U. Por exemplo, podemos considerar

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{ad} &= \mathcal{U} \\ \mathcal{U}_{ad} &= \left\{ v \in \mathcal{U}; \ v \geq 0 \ \text{q.s em } (0,T) \right\}. \end{aligned} \tag{1.6}$$

Para as aplicações, os controles devem ser positivos.

#### **1.5.3** Propriedades do Funcional de Custo J

• J é estritamente convexo sobre  $\mathcal{U}_{ad}$ .

De fato: Considere

$$J(v) = J_1(v) + J_2(v), \quad \forall \ v \in \mathfrak{U}_{ad}$$

onde

$$J_1(v) = \int_{\Omega} |y(x,T;v) - z_d|^2 dx \quad \text{e} \quad J_2(v) = N \int_0^T |v|^2 dt.$$

É fácil ver que  $J_1$  e  $J_2$  são convexos.

Para mostrar que J é estritamente convexo, basta mostrar que  $J_1(v)$  ou  $J_2(v)$  é estritamente convexo, o que vamos fazer para  $J_2(v)$ .

Assim,  $\forall \ \theta \in (0,1)$  e  $\forall \ u, v \in \mathcal{U}_{ad}$ , com  $u \neq v$ , temos

$$J_{2}(\theta u + (1-\theta)v) = N \int_{0}^{T} |\theta u + (1-\theta)v|^{2} dt$$
  
=  $N\theta^{2} \int_{0}^{T} u^{2} dt + 2N\theta(1-\theta) \int_{0}^{T} uv dt + N(1-\theta)^{2} \int_{0}^{T} v^{2} dt.$ 

Usando  $2ab < a^2 + b^2$  se $a \neq b,$  chegamos a

$$J_{2}(\theta u + (1 - \theta)v) < N\theta^{2} \int_{0}^{T} u^{2} dt + N(\theta - \theta^{2}) \int_{0}^{T} u^{2} dt + N(\theta - \theta^{2}) \int_{0}^{T} v^{2} dt + N(1 - 2\theta + \theta^{2}) \int_{0}^{T} v^{2} dt.$$

Disto, segue o resultado.

• Da definição de Je do fato de  $v\mapsto y(x,T;v)$  ser contínua, temos

 $v \mapsto J(v)$  é contínua sobre  $\mathcal{U}_{ad}$ .

• Temos que  $J(v) \ge c ||v||_{\mathcal{U}}^2 - \int_{\Omega} |z_d|^2 dx$ , então

$$J(v) \to \infty$$
 se  $||v||_{\mathcal{U}} \to \infty$ ,  $v \in \mathcal{U}_{ad}$ .

Das definições e propriedades de  $\mathcal{U}$ ,  $\mathcal{U}_{ad}$ , J e considerando o Teorema 1.1, temos o seguinte Teorema.

**Teorema 1.3.** Seja o convexo fechado  $U_{ad}$  definido em (1.6). Então, existe um único controle ótimo  $u \in U_{ad}$  que minimiza o funcional de custo J.

O par (u, y(u)) é chamado de **solução ótima** para o sistema de estado (1.2)-(1.4).

Aqui, temos resolvido o problema (P1).

# 1.6 Caracterização do Controle Ótimo

Resolução do problema (P2):

**Teorema 1.4.** Seja  $\mathcal{U}_{ad}$  definido em (1.6), então o controle ótimo u é caracterizado por

$$\int_{\Omega} \left[ y(x,T;u) - z_d \right] y(x,T;v-u) dx + N \int_0^T u(v-u) dt \ge 0, \quad \forall \ v \in \mathcal{U}_{ad} \ e \ u \in \mathcal{U}_{ad}.$$
(1.7)

Demonstração. Considere

$$f(\theta) = J\left((1-\theta)u + \theta v\right), \ \forall \ v \in \mathfrak{U}_{ad}, \ u \in \mathfrak{U}_{ad} \ e \ 0 \le \theta \le 1.$$

Donde, temos

$$f(0) \le f(\theta), \ \forall \ \theta \in [0,1].$$

Assim, f tem um mínimo em zero e da<br/>í $f'(0) \geq 0.$ Diferenciando  $f(\theta),$ temos

$$\begin{aligned} f'(\theta) &= 2 \int_{\Omega} \left[ y\left(x, T; (1-\theta)u + \theta v\right) - z_d \right] y(x, T; v - u) dx \\ &+ 2N \int_{\Omega} \left[ (1-\theta)u + \theta v \right] (v - u) dx, \quad \forall \ v \in \mathfrak{U}_{ad}, \ u \in \mathfrak{U}_{ad}. \end{aligned}$$

Usando que  $f'(0) \ge 0$ , segue o resultado.

A estimativa obtida em (1.7) não é adequada, pois não descreve u de forma explícita. Passaremos então a calcular uma nova estimativa a partir do Estado Adjunto que definiremos a seguir.

#### 1.6.1 Estado Adjunto

Para explicitar u na inequação (1.7), introduzimos o Sistema de Estado Adjunto dado por

$$\begin{aligned} &-\frac{\partial q}{\partial t} - \lambda \Delta q - \beta \cdot \nabla q = 0 & \text{em } \Omega \times (0,T) \\ &q(x,T) = y(T;u) - z_d & \text{em } \Omega \\ &q(x,t) = 0 & \text{sobre } \partial \Omega \times (0,T). \end{aligned}$$

Onde q(x,T) é dado em  $L^2(\Omega)$ .

O sistema acima admite uma única solução

$$q \in L^2(0,T;V) \cap C^0([0,T];H^1(\Omega))$$
 e  $\frac{\partial q}{\partial t} \in L^2(0,T;H^{-1}(\Omega)).$ 

Fazendo uso do Sistema Adjunto definido acima, temos o seguinte Teorema.

**Teorema 1.5.** Seja  $U_{ad}$  definido em (1.6), então a condição(1.7) é equivalente à

$$\int_0^T \left( \int_\Omega q \, \phi \, dx + Nu \right) (v - u) dt \ge 0, \quad \forall \ v \in \mathfrak{U}_{ad}, \quad u \in \mathfrak{U}_{ad}.$$

**Observação 3:** Note que a estimativa obtida acima é melhor que a (1.7), e neste caso é possível obter u explicitamente para alguns convexos  $U_{ad}$ .

Por exemplo, se consideramos

•  $U_{ad} = U$ , obtemos

$$\int_0^T \left( \int_\Omega q \, \phi \, dx + Nu \right) w \, dt \ge 0, \quad \forall \, w = v - u \in \mathfrak{U}_{ad}$$

Substituindo w por -w acima, tem-se

$$u = -\frac{1}{N} \int_{\Omega} q \, \phi \, dx.$$

Ou se consideramos

•  $\mathfrak{U}_{ad} = \{ v \in \mathfrak{U}; v \ge 0 \text{ q.s em } (0,T) \}$ , obtemos que o controle ótimo é dado por

$$u = \left(\frac{1}{N} \int_{\Omega} q \, \phi \, dx\right)^{-1}$$

#### 1.6.2 Sistema de Otimalidade

O sistema de otimalidade é fundamental para o cálculo numérico da solução do problema. Aqui, consideramos o subconjunto  $\mathcal{U}_{ad}$  convexo e fechado definido em (1.6).

De acordo com o que foi visto, temos o seguinte Teorema.

**Teorema 1.6.** Seja  $U_{ad}$  definido em (1.6), então o controle ótimo u, que minimiza o funcional de custo J, é caracterizado pela única solução  $\{u, y, q\}$  do sistema de otimalidade

$$\frac{\partial y}{\partial t} - \lambda \Delta y + \beta \cdot \nabla y = \left(\frac{1}{N} \int_{\Omega} q \phi \, dx\right)^{-} \phi(x) \qquad \text{em} \quad \Omega \times (0, T)$$
$$-\frac{\partial q}{\partial t} - \lambda \Delta q - \beta \cdot \nabla q = 0 \qquad \text{em} \quad \Omega \times (0, T)$$
$$y(x, 0) = 0 \qquad q(x, T; u) = y(x, T; u) - z_d \qquad \text{em} \quad \Omega \times (0, T)$$
$$y(x, t) = q(x, t) = 0 \qquad \text{sobre} \quad \partial \Omega \times (0, T).$$

Observemos que o sistema (1.8) não é um problema de Cauchy. Ainda, este sistema está acoplado. Assim, para resolver o sistema (1.8), precisamos desacoplar este sistema. A idéia é construir um algoritmo iterativo para calcular a solução numérica do problema.

### 1.7 Aproximação e Convergência Numérica

Para resolver numericamente (1.8), consideramos  $n \in \mathbb{N}$  e desacoplamos o sistema da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial y^n}{\partial t} - \lambda \Delta y^n + \beta \cdot \nabla y^n &= \left(\frac{1}{N} \int_{\Omega} q^n \phi \, dx\right)^- \phi(x) & \text{em } \Omega \times (0, T) \\ -\frac{\partial q^n}{\partial t} - \lambda \Delta q^n - \beta \cdot \nabla q^n &= 0 & \text{em } \Omega \times (0, T) \\ y^n(x, 0) &= 0 & \text{em } \Omega \times (0, T) \\ q^n(x, T; u) &= y^{n-1}(x, T; u) - z_d & \text{em } \Omega \\ y^n(x, t) &= q^n(x, t) = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T) \\ y^0(x, T) &= \text{ dado em } H^1(\Omega). \end{aligned}$$

O próximo teorema mostra que a solução do sistema desacoplado (1.9) converge para a solução do sistema acoplado (1.8).

**Teorema 1.7.** Seja  $z_d \in L^2(\Omega)$  e N suficientemente grande. Então, a solução do sistema (1.9) converge em  $L^2(0,T;L^2(\Omega))$  para a solução do sistema (1.8), quando  $n \to \infty$ .

**Demonstração.** Idéia: Considere  $R^n = y^n - y$  e  $S^n = q^n - q$ . Dos sistemas (1.8) e (1.9), obtemos

$$\begin{split} R_t^n - \lambda \Delta R^n + \beta \cdot \nabla R^n &= \left[ \left( \frac{1}{N} \int_{\Omega} q^n \phi dx \right)^- - \left( \frac{1}{N} \int_{\Omega} q \phi dx \right)^- \right] \phi & \text{em } \Omega \times (0, T) \\ -S_t^n - \lambda \Delta S^n - \beta \cdot \nabla S^n &= 0 & \text{em } \Omega \times (0, T) \\ R^n(x, 0) &= 0 & \text{em } \Omega \\ S^n(x, T) &= R^{n-1}(x, T) & \text{em } \Omega \\ R^n(x, t) &= S^n(x, t) = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T). \end{split}$$

Mostrando que

$$R^n, S^n \to 0 \quad \text{em} \quad L^2\bigl(0,T;L^2(\Omega)\bigr), \quad \text{quando} \quad n \to \infty,$$

obtém-se o resultado.

# Capítulo 2

# Controle Ótimo: Parte Numérica

## 2.1 Solução Numérica

Vamos usar o método estabilizado de elementos finitos combinado com método iterativo para calcular a solução numérica do sistema (1.9).

#### 2.1.1 Formulação Variacional

A formulação variacional do sistema (1.9) consiste em encontrar

$$y^n, q^n \in V = H^1_0(\Omega)$$

 ${\it satisfazendo}$ 

$$\left(\frac{\partial y^n}{\partial t}, v\right) + \lambda \left(\nabla y^n, \nabla v\right) + \left(\beta \cdot \nabla y^n, v\right) = (F^n, v)$$

$$-\left(\frac{\partial q^n}{\partial t}, v\right) + \lambda \left(\nabla q^n, \nabla v\right) - \left(\beta \cdot \nabla q^n, v\right) = 0$$
(2.1)

 $\forall v \in V.$  Com condições iniciais, final e "chute final"

$$y^{n}(x,0) = 0$$

$$q^{n}(x,T) = y^{n-1}(x,T;u) - z_{d}$$

$$y^{0}(\cdot,T) = \text{ dado em } H^{1}(\Omega)$$

$$(2.2)$$

onde

$$F^n = \left(\frac{1}{N}\int_{\Omega} q^n \phi dx\right)^- \phi.$$

### 2.1.2 O Problema Aproximado Via Elementos Finitos

Considere um domínio poligonal e uma discretização em  $N_e$  elementos quadriláteros; ou seja

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{N_e} \overline{\Omega}^e,$$

satisfazendo as condições de uma malha de elementos finitos (ver Hughes [6]) e Morton [11]), onde  $\Omega^e$  denota o interior do elemento genérico "e", e  $\overline{\Omega}^e$  seu fecho. O parâmetro da malha é dado por  $h = \max h_e, e = 1, 2, ..., N_e$ , onde  $h_e$  é o diâmetro do elemento e. Seja  $V_h(\Omega) \subset C^0(\Omega)$ espaço de elementos finitos dados por

$$V_h = \{ v_h \in V ; v_h^e \in P^1(\Omega^e) \},\$$

onde  $v_h^e$  é a restrição de  $v_h$  ao elemento "e" e  $P^1(\Omega^e)$  é o conjunto de polinômios bilineares definidos em  $\Omega^e$ .

Aplicaremos a formulação de Streamline-Upwind/Petrov-Galerkin - SUPG neste subespaço (ver Hughes [6]) e Morton [11]).

#### 2.1.3 O Problema Semidiscreto

Consiste na discretização apenas na variável espacial usando o método de elementos finitos.

Seja  $V_h \subset V$  o espaço de elementos finitos definido anteriormente. As aproximações dos problemas (2.1)-(2.2), através do método de SUPG, são dadas por: Encontrar  $y_h^n$ ,  $q_h^n \in V_h$ , tais que

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial y_h^n}{\partial t}, v_h \end{pmatrix} + \lambda \left( \nabla y_h^n, \nabla v_h \right) + \left( \beta \cdot \nabla y_h^n, v_h \right) + \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega^e} \left( \frac{\partial y_h^n}{\partial t} - \lambda \Delta y_h^n + \beta \cdot \nabla y_h^n - F_h^n \right) \tau \beta \cdot \nabla v_h \, d\Omega^e = (F_h^n, v_h), - \left( \frac{\partial q_h^n}{\partial t}, v_h \right) + \lambda \left( \nabla q_h^n, \nabla v_h \right) - \left( \beta \cdot \nabla q_h^n, v_h \right) - \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega^e} \left( -\frac{\partial q_h^n}{\partial t} - \lambda \Delta q_h^n - \beta \cdot \nabla q_h^n \right) \tau \beta \cdot \nabla v_h \, d\Omega^e = 0,$$

$$(2.3)$$

 $\forall v_h \in V_h$ . Com condições iniciais, final e "chute final"

$$y_{h}^{n}(x,0) = 0$$

$$q_{h}^{n}(x,T) = y_{h}^{n-1}(x,T;u) - z_{d}$$

$$y_{h}^{0}(x,T) = \text{ dado em } H^{1}(\Omega),$$
(2.4)

onde  $t \in [0, T]$  e  $\tau = \frac{h}{2|\beta|}$ . Os problemas (2.3)-(2.4) são chamados de aproximações semidiscretas ou de aproximações contínuas no tempo, já que a variável temporal não está sendo discretizada.

 $04(2) \cdot 2009$ 

Nosso próximo passo é fazer as discretizações dos problemas (2.3)-(2.4) na variável temporal.

#### 2.1.4 O Problema Totalmente Discretizado

Usaremos diferenças finitas na discretização temporal, aplicaremos o esquema de Euler Implícito. Primeiro, dividimos o intervalo [0, T] em subintervalos  $[t_{j-1}, t_j]$ , onde  $t_j = j\Delta T$ ,  $j = 1, \ldots, k$ com  $t_0 = 0$  e  $t_k = T$ . Assim, o esquema de Euler Implícito, para aproximar os termos  $y_t$  e  $q_t$  é dado por

$$\frac{\partial y(x,t_j)}{\partial t} = \frac{y_j - y_{j-1}}{\Delta t} \qquad e \qquad \frac{\partial q(x,t_j)}{\partial t} = \frac{q_{j+1} - q_j}{\Delta t}$$
(2.5)

Logo, substituindo (2.5) nos problemas variacionais (2.3) e (2.4), os problemas completamente discretizados são escritos na forma: Dado j = 1, ..., k, encontrar  $y_{h,j}^n$ ,  $q_{h,j}^n \in V_h$ , tais que

$$\begin{split} \left(\frac{y_{h,j}^{n}}{\Delta t}, v_{h}\right) + \lambda \left(\nabla y_{h,j}^{n}, \nabla v_{h}\right) + \left(\beta \cdot \nabla y_{h,j}^{n}, v_{h}\right) \\ &+ \sum_{e=1}^{N_{e}} \int_{\Omega^{e}} \left(\frac{y_{h,j}^{n}}{\Delta t} - \lambda \Delta y_{h,j}^{n} + \beta \cdot \nabla y_{h,j}^{n}\right) \tau \beta \cdot \nabla v_{h} d\Omega^{e} \\ &= \left(F_{h,j}^{n} + \frac{y_{h,j-1}^{n}}{\Delta t}, v_{h}\right) + \sum_{e=1}^{N_{e}} \int_{\Omega^{e}} \left(F_{h,j}^{n} + \frac{y_{h,j-1}^{n}}{\Delta t}\right) \tau \beta \cdot \nabla v_{h} d\Omega^{e}, \\ \left(\frac{q_{h,j}^{n}}{\Delta t}, v_{h}\right) + \lambda \left(\nabla q_{h,j}^{n}, \nabla v_{h}\right) - \left(\beta \cdot \nabla q_{h,j}^{n}, v_{h}\right) \\ &- \sum_{e=1}^{N_{e}} \int_{\Omega^{e}} \left(\frac{q_{h,j}^{n}}{\Delta t} - \lambda \Delta q_{h,j}^{n} - \beta \cdot \nabla q_{h,j}^{n}\right) \tau \beta \cdot \nabla v_{h} d\Omega^{e} \\ &= \left(\frac{q_{h,j+1}^{n}}{\Delta t}, v_{h}\right) - \sum_{e=1}^{N_{e}} \int_{\Omega^{e}} \frac{q_{h,j+1}^{n}}{\Delta t} \tau \beta \cdot \nabla v_{h} d\Omega^{e}, \end{split}$$

 $\forall v_h \in V_h.$  Com condições iniciais, final e "chute final"

$$y_{h,0}^{n}(x) = 0$$
  

$$q_{h,k}^{n}(x) = y_{h,k}^{n-1}(x;u) - z_{d}$$
  

$$y_{h,k}^{0}(x) = \text{dado.}$$

# 2.1.5 Algoritmo de Resolução

Para a solução deste problema, usamos o seguinte algoritmo.

$$\begin{split} \text{Dado } y_{h,k}^{0}, \text{para } n &= 1, \dots, N_{p}. \\ \\ \begin{vmatrix} q_{h,k}^{n} &= y_{h,k}^{n-1} - z_{d}. \\ \text{Para } j &= k - 1, \dots, 0, \text{ encontrar } q_{h,j}^{n} \in V_{h}, \text{ satisfazendo} \\ \begin{vmatrix} \left(q_{h,j}^{n}, v_{h}\right) + \lambda \Delta t \left(\nabla q_{h,j}^{n}, \nabla v_{h}\right) - \Delta t \left(\beta \cdot \nabla q_{h,j}^{n}, v_{h}\right) \\ &- \sum_{e=1}^{N_{e}} \int_{\Omega^{e}} \left(q_{h,j}^{n} - \lambda \Delta t \Delta q_{h,j}^{n} - \Delta t \beta \cdot \nabla q_{h,j}^{n}\right) \tau \beta \cdot \nabla v_{h} d\Omega^{e} \\ &= \left(q_{h,j+1}^{n}, v_{h}\right) - \sum_{e=1}^{N_{e}} \int_{\Omega^{e}} q_{h,j+1}^{n} \tau \beta \cdot \nabla v_{h} d\Omega^{e}, \quad \forall v_{h} \in V_{h}. \\ y_{h,0}^{0} &= 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Para } j &= 1, \dots, k, \text{ encontrar } y_{h,j}^{n} \in V_{h}, \text{ satisfazendo} \\ \begin{vmatrix} \left(y_{h,j}^{n}, v_{h}\right) + \lambda \Delta t \left(\nabla y_{h,j}^{n}, \nabla v_{h}\right) + \Delta t \left(\beta \cdot \nabla y_{h,j}^{n}, v_{h}\right) \\ &+ \sum_{e=1}^{N_{e}} \int_{\Omega^{e}} \left(y_{h,j}^{n} - \lambda \Delta t \Delta y_{h,j}^{n} + \Delta t \beta \cdot \nabla y_{h,j}^{n}\right) \tau \beta \cdot \nabla v_{h} d\Omega^{e} \\ &= \left(\Delta t F_{h,j}^{n} + y^{n}_{h,j-1}, v_{h}\right) + \sum_{e=1}^{N_{e}} \int_{\Omega^{e}} \left(\Delta t F_{h,j}^{n} + y_{h,j-1}^{n}\right) \tau \beta \cdot \nabla v_{h} d\Omega^{e}, \\ &\forall v_{h} \in V_{h}, \quad \text{onde } F_{h,j}^{n} &= \left(\frac{1}{N} \int_{\Omega} q_{h,j}^{n} \phi_{h} dx\right)^{-} \phi_{h}. \end{aligned}$$

## 2.2 Aplicações

Consideramos o caso de Poluição Ambiental. O problema (1.2)-(1.4) modela a concentração de uma substância poluente/contaminante em uma determinada região  $\Omega$ . Consideramos que a concentração varia no tempo e que esta substância, poluente/contaminante é difundida e convectada na região  $\Omega$ . As aplicações incluem o meio ambiente físico, onde a concentração varia de acordo com a velocidade do meio. Em nosso modelo, consideramos que o poluente é disseminado em um meio incompressível.

Como uma aplicação, estudamos o caso da contaminação de um rio/lagoa pelo mercúrio em água parada e em movimento. Pela Legislação Brasileira, o máximo aceitável  $z_d$  do mercúrio, em água potável e em efluentes é tabelado por

Neste caso: Água potável: 
$$z_d = 2 \times 10^{-6} mg/l$$
.  
Efluentes:  $z_d = 2 \times 10^{-3} mg/l$ .

Consideramos: Caso de Água parada:  $\beta = 0$ . Caso de Água em movimento:  $\beta \neq 0$ .

O objetivo maior desta parte do trabalho é minimizar, através dos controles, os efeitos causados pelo agente poluente. Ou seja, o problema é determinar estágios (usando os controles) de tal forma a minimizar os efeitos da poluição causados por detritos contendo mercúrio.

#### 2.2.1 Resultados Computacionais

O objetivo aqui é validar o modelo matemático, junto ao modelo numérico. Esta tarefa não é simples, já que tanto para o modelo matemático, quanto para o modelo numérico não se dispõe de soluções comparativas.

Nas aplicações, para que o modelo faça sentido físico e represente uma situação prática, escolhemos  $\Omega$  uma região retangular, cujas fronteiras  $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3 \in \Gamma_4$  representam o trecho de um rio a ser estudado. As fronteiras  $\Gamma_2 \in \Gamma_4$  correspondem à largura do rio e as fronteiras  $\Gamma_1 \in \Gamma_3$ seu comprimento. A velocidade da água é dada na direção do comprimento do rio no sentido de  $\Gamma_3$ .



E, consideramos o seguinte sistema de estado

$$\frac{\partial y}{\partial t} - \lambda \Delta y + \beta \cdot \nabla y = F(x, t) \qquad \text{em} \quad \Omega \times (0, T) \tag{2.6}$$

$$y(x,0) = 0 \qquad \text{em} \quad \Omega \tag{2.7}$$

$$y(x,t) = 0$$
 sobre  $\Gamma_1 \times (0,T)$  (2.8)

$$\frac{\partial y}{\partial \nu}(x,t) = 0$$
 sobre  $(\Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4) \times (0,T).$  (2.9)

A condição (2.7) diz que no instante inicial a poluição é nula, a condição (2.8) significa que, em qualquer tempo  $t \in (0,T)$ , na fronteira  $\Gamma_1$  não há poluição e a condição (2.9) diz que o fluxo difusivo de poluição, através das fronteiras  $\Gamma_2$ ,  $\Gamma_3$  e  $\Gamma_4$  é nulo.

A seguir, apresentamos uma tabela com os valores usados nos gráficos.

Coeficiente de difusão-Hg $(cm^2/s)$	$\lambda = 6 \times 10^{-6}$
Nível aceitável do $\operatorname{Hg}(mg/cm^3)$	$z_d = 2 \times 10^{-6} sen(\pi x/L) sen(\pi y/L)$
Vetor velocidade $(cm/s)$	$\beta = 10^{-4} \left( 1 - \left( \frac{y - L/2}{L/2} \right)^2 , 0 \right)$
Constante de custo	$N = 15 \times 10^4$
Tempo final $(s)$	T = 8640000

Tabela 1: Valores usados nos gráficos.

#### Consideramos ainda

• Domínio:  $\Omega = (0, 100) \times (0, 100) cm^2$ .

- Malha de 10000 elementos quadráticos com  $\Delta x = \Delta y = 1 \, cm$ .
- Passos no tempo: 400 com  $\Delta t = 21600 s$  fixado.
- $\omega$  um quadrado de lado l centrado em  $b \in \omega \subset \Omega$  e

$$\phi_l(x) = \begin{cases} \frac{1}{l^2} & \text{se } x \in \omega, \\ 0 & \text{se } x \notin \omega, \end{cases}$$

 $04(2) \cdot 2009$ 

Primeiro, analisamos os casos de uma única fonte poluente em água parada e variamos o local de entrada do poluente. Em seguida, consideramos o caso em que o poluente é convectado e, também, variamos o local de entrada do poluente. Ainda, consideramos o caso de múltiplas fontes poluentes em água parada e em movimento. Finalmente, consideramos um controle admissível arbitrário.

Usamos um código em Fortran 90 com elementos bilineares.

#### Gráficos e Análise

Nos gráficos (2.1)-(2.3), consideramos apenas uma fonte poluente situada na região central do domínio e a velocidade de convecção é nula, estes são casos em que a água está parada e portanto, temos apenas o espalhamento do poluente devido à difusão.







Neste caso, de água parada, constatamos que inicialmente podemos despejar uma certa quantidade de poluente u, e no transcorrer do tempo esta quantidade diminue de modo que a concentração de poluição no tempo final y(x,T;u(T)) não ultrapasse o valor máximo aceitável  $z_d$ . Notamos, ainda, que o controle u é decrescente e, através dos gráficos da concentração, que ao diminuirmos a região quadrangular  $\omega$ , isto é, quando fazemos  $l \to 0$ , passamos de um perfil de fonte localizada para um perfil de fonte pontual.

No que segue, ainda considerando que a velocidade de convecção é nula, ou seja, água parada, variando o local de entrada do poluente, temos os seguintes gráficos (2.4) e (2.5).

100





Nos gráficos (2.3)-(2.5), escolhemos a região  $\omega$  de entrada de poluente, com área  $0.2 \times 0.2 \, cm^2$ , em posições diferentes no domínio  $\Omega$ . Observamos que a quantidade de poluente despejada depende da localização da fonte. Percebemos que na região central, o poluente tem mais liberdade de espalhamento; logo, podemos despejar maior quantidade de poluente nesse local. A concentração de poluição no tempo final atinge um índice maior, próximo a  $z_d$ . Agora, conforme a fonte se afasta da região central do domínio, a quantidade de poluente despejada diminui e portanto, a concentração de poluição, também, diminui. Aqui, também, com o passar do tempo, esta quantidade de poluente despejada deve ser diminuída para que a concentração de poluição no tempo final não exceda o valor  $z_d$ . O controle u é, também, decrescente. Os valores dos funcionais de custo J encontrados nos gráficos (2.3), (2.4) e (2.5), respectivamente, são

$$J(u) = 9.62 \times 10^{-9}, \quad J(u) = 9.98 \times 10^{-9}, \quad J(u) = 1.23 \times 10^{-8}.$$

Observamos que quando a água está parada, o funcional de custo J aplicado no controle ótimo u é menor quando o local de entrada do poluente está no centro da região  $\Omega$ , isto nos leva a crer que a melhor localização para o despejo do poluente é a região central do domínio.

Agora, consideramos os casos em que a água está em movimento, isto é,  $\beta(x, y) \neq (0, 0)$ .



Verificamos, através dos gráficos do controle u, que devemos começar despejando uma certa quantidade de poluente e ao passar do tempo, esta quantidade pode ser aumentada e depois diminuída de modo que a concentração não ultrapasse o valor  $z_d$ . Observemos que u é crescente e decrescente. Aqui, notamos um comportamento semelhante ao caso de água parada, para a concentração do poluente, quando diminuímos a região  $\omega$  de entrada do poluente.

Analisaremos, agora, os casos de múltiplas fontes poluentes. Consideramos 3 fontes. Para gráfico (2.8), água parada e para o gráfico (2.9), água em movimento.



 $\begin{array}{ll} & -----: & u_1 \text{ para a fonte situada na região } \omega = (19.9, 20.1) \times (14.9, 15.1). \\ & +++++: & u_2 \text{ para a fonte situada na região } \omega = (49.9, 50.1) \times (49.9, 50.1). \\ & \diamond \diamond \diamond \diamond \diamond \diamond : & u_3 \text{ para a fonte situada na região } \omega = (79.9, 80.1) \times (69.9, 70.1). \end{array}$ 



Aqui, também, observamos que tanto o controle ótimo, quanto a concentração de poluição se comportam analogamente ao caso de uma única fonte. Chamamos a atenção para os gráficos (2.3)-(2.5) e (2.8), onde escolhemos, propositalmente, os mesmos locais de entrada do poluente.

Por fim, analisamos um caso em água parada e em movimento, considerando um controle admissível arbitrário. Tomando o controle arbitrário  $v(t) = 2 \times 10^{-11} t/8640000 mg/cm^3$ .



temos as concentrações de poluente referentes a este controle arbitrário



Concentração do poluente: y(x,T;v(T))

Para o caso em que a água está parada, escolhemos a mesma região de entrada de poluente do gráfico (2.3) e para água em movimento a mesma região do gráfico (2.7). Os valores dos funcionais de custo J encontrados nestes casos são

$$J(u) = 9.62 \times 10^{-9} \quad \text{para o gráfico (2.3).}$$
  

$$J(v) = 1.02 \times 10^{-8} \quad \text{para o gráfico (2.11) (a).}$$
  

$$J(u) = 9.73 \times 10^{-9} \quad \text{para o gráfico (2.7).}$$
  

$$J(v) = 1.01 \times 10^{-8} \quad \text{para o gráfico (2.11) (b).}$$

Notemos que o valor de J é menor quando o controle é ótimo, o que de fato deveria ocorrer. Observemos, ainda, comparando os gráficos da concentração (2.3) e (2.7) com os gráficos (2.11) (a) e (b), que a concentração de poluente atinge índices mais elevados, quando usamos um controle admissível arbitrário, o que também está de acordo com nossa teoria.

#### 2.2.2 Conclusão

Analiticamente, podemos obter os mesmos resultados considerando outras condições de fronteiras no sistema (1.2)-(1.4).

Consideramos um subconjunto admissível  $\mathcal{U}_{ad}$  com restrições, isto dificulta a análise numérica do problema, pois chegamos a um sistema de otimalidade não linear, que não é um problema de Cauchy, é um sistema composto por uma equação de valor inicial e outra de valor final.

Numericamente, observamos que a solução do problema condiz com o esperado e apresenta um comportamento muito bom, quando a convecção é nula ou pequena comparada com a difusão. Entretanto, para o caso em que aumenta a velocidade da água, surgem algumas dificuldades inerentes ao termo de convecção e estas dificuldades são, ainda, maiores à medida que a velocidade aumenta mais; pois, o escoamento passa a ter um carácter predominantemente convectivo e portanto, instabilidades e oscilações são observadas, o que é corrigido com o uso do método estabilizado SUPG.

Observamos que ao diminuir a região  $\omega \subset \Omega$  de entrada do poluente, o comportamento do sistema com fonte localizada se aproxima de um sistema com fonte pontual, podemos observar isto claramente, por exemplo, nos gráficos (2.1)-(2.3) e (2.6)-(2.7).

Quando tomamos um controle admissível arbitrário, comprovamos numericamento (o que já sabíamos teoricamente) que o controle ótimo, de fato, é o que minimiza o funcional de custo. A escolha dos valores dos parâmetros do modelo; como por exemplo, tempo final, tamanho do domínio, velocidade de convecção, visa adequação a um caso real. É claro que como se trata de *modelagem*, não se pode esquecer que o modelo expressa a realidade dos casos dentro de sua própria linguagem, carregando com isso suas limitações. Notamos que a escolha destes parâmetros influenciam o controle ótimo e, consequentemente, o custo final obtido. Isto significa que os valores desses parâmetros devem sempre ser levados em consideração .

Quanto a função  $z_d$ , poderíamos considerá-la, também, dependente do tempo.

Repetidas simulações foram realizadas variando os parâmetros do modelo e em todos os casos constatamos a convergência do método.

# **Referências Bibliográficas**

- [1] Adams, R. A., Sobolev Spaces. Acad. Press, New York, (1975).
- [2] Banks, H. T., Control and Estimation in Distributed Parameter Systems. Siam, Philadelphia, 1992.
- [3] Bedient, P. B., Rifai, H. S. and Newell, C. J., Ground Water Contamination Transport and Remediation. Prentice - Hall PTR, New Jersey, (1994).
- [4] Brézis, H., Análisis Funcional Teoría y Aplicaciones. Alianza Editorial, Madrid, (1984).
- [5] Ferreira, Q. M. Riscos de uso do Mercúrio Metálico para Medir a Pressão Arterial Média (PAM). UNICAMP - Central de Material Esterilizado - H. C., (2000).
- [6] Hughes, J. T., The finite Element Method Linear static and Dynamical Finite Element Analysis, Dover Publications, INC. Mineola, New York, (2000).
- [7] Joshi, H. R., Control of the Convective Velocity Coefficient in a Parabolic Problem. Proceeding of World Congress on Nonlinear Analysis - 2005
- [8] Lions, J. L., Optimal Control of Systems Gouverned by Partial Differential Equations, Springer - Verlag, New York, (1971).
- [9] Lions, J. L., Function Spaces and Optimal Control of Distributed Systems, Rio de Janeiro, (1980).
- [10] Lions, J. L., Some Aspects of the Optimal Control of Distributed Parameter Systems, Paris, (1972).
- [11] Morton, K. W., Numerical Solution of Convection-Diffusion Problems. Oxford, UK, (1996).

- [12] Neittaanmäki, P. and Tiba, D., Optimal Control of Nonlinear Parabolic Systems. Theory, Algorithms and Applications. (1994).
- [13] Programa da Nações Unidas para o Meio Ambiente PNUMA ONU. Primeiro Relatório Anual, (2003).
- [14] Pichard, A., Mercury and its Derivatives. Institut National de L'Environnement Industriel et des Risques - INERIS. Version No. 1, July (2000), 1-45.
- [15] Rivera, J. E. M., Teoria das distribuições e Equações Diferenciais Parciais, Textos Avançados, LNCC - Petrópolis - Rio de Janeiro, (1999).
- [16] Zheng, C. and Bennet, G. D., Applied Contaminant Transport Modeling Theory and Practice. Van Nostrand Reinhold eds., A Division of International Thomson Publishing Inc. (1995).