

# Diferentes estrategias para el análisis y resolución numérica de problemas de gestión medioambiental en zonas costeras

Néstor García Chan  
Departamento de Matemática Aplicada  
Escola Politécnica Superior. Lugo  
Universidade de Santiago de Compostela

Tesis Doctoral



2009



El presente trabajo de tesis doctoral, fue presentada por D. Néstor García Chan en el Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Santiago de Compostela.

La dirección del trabajo fue llevada a cabo por los Profesores Doctores Miguel Ernesto Vázquez Méndez y Lino José Álvarez Vázquez.

La defensa de tesis tuvo lugar el día 18 de diciembre de 2009, ante el tribunal constituido por los profesores:

PRESIDENTE:

Dr. D. Alfredo Bermúdez de Castro López-Varela,  
Universidad de Santiago de Compostela.

VOCALES:

Dr. D. Carlos Parés Madroñal,  
Universidad de Málaga.

Dr. D. Angel Manuel Ramos del Olmo,  
Universidad Complutense de Madrid.

Dr. D. Julio Rodríguez Banga  
Instituto de Investigaciones Marinas, Vigo.

SECRETARIO:

Dra. Dña. Carmen Rodríguez Iglesias,  
Universidad de Santiago de Compostela.

Calificación: **Sobresaliente cum Laude.**



# Agradecimientos

Es justo dedicar unas líneas a todas aquellas personas e instituciones que hicieron posible llegar al final de mis estudios de doctorado.

Con especial cariño a mi madre Martha, a mis hermanos, a toda mi familia y a mis amistades en Guadalajara (México), a todos por brindarme su apoyo y sus buenos deseos al tomar la decisión de estudiar un doctorado en España, sin esto no hubiera podido siquiera comenzar el largo camino, y su recuerdo fue crucial sobretodo en situaciones de soledad y tristeza al estar lejos del hogar.

Por supuesto a las instituciones que tuvieron confianza en mí, proporcionandome el apoyo económico necesario a lo largo de mis estudios, así pues doy las gracias al Programa de Becas para Estudiantes Latinoamericanos (AlBan) de la Unión Europea y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) de México.

Al Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Santiago de Compostela, por darme la oportunidad de ingresar al posgrado, y al Coordinador del posgrado Dr. Oscar López Pouso que siempre estuvo disponible para aclarar mis dudas, sobre todo en el difícil inicio de mi estancia en Santiago.

El doctorado fue desarrollado en etapas, así tuve la oportunidad de conocer a varios profesores que mostraron poseer un gran nivel académico en sus áreas correspondientes y de los cuales considero recibí una buena formación.

En esta primera etapa en particular agradezco al Dr. Rafael Muñoz Sola quien fue mi co-tutor del trabajo de investigación que presente para obtener el DEA, ya que siempre tuvo la disposición de resolver mis dudas y siempre estuvo al pendiente de mis progresos, además sus observaciones fueron base para realizar la defensa del trabajo.

En la etapa de desarrollo de la tesis agradezco las correcciones, observaciones y aportaciones que realizaron los profesores Dra. Aurea Martínez Varela y Dr. Lino José Álvarez Vázquez, fueron fundamentales para elaborar todo el trabajo. En la misma línea mención especial merece el profesor Dr. Miguel Ernesto Vázquez Méndez que fue desde el inicio hasta el final del doctorado mi guía, tanto en cuestiones puramente académicas como en otros aspectos más concernientes a la camaradería entre dos personas; primero en el trabajo del DEA y posteriormente en el trabajo de tesis, siempre estuvo dispuesto a hacer correcciones, lecturas y mejoras, así que mucho del merito por haber logrado terminar mis

estudios es gracias a su dedicación, por lo que siempre le voy a estar totalmente agradecido y espero seguir trabajando con él cualquiera que sea el lugar donde decida asentarme.

Agradezco además a los profesores Dr. Alfredo Bermúdez De Castro, Dra. Carmen Rodríguez Iglesias y Miguel Angel Vilar Rivas, por su gentileza al permitir el uso de código FORTRAN desarrollado por ellos, siendo este de una gran importancia en el trabajo de tesis y del posterior desarrollo del software SOS.

Por supuesto que no todo fue estudio y trabajo, me siento afortunado al vivir en ciudades como Santiago y Lugo, ciudades pequeñas en donde la vida está llena de tranquilidad, ahí tuve la fortuna de hacer amistades con gente tanto de España como de otros países de Europa y Latinoamérica, con ellos pase momentos inolvidables de diversión, pero también tuve su apoyo en momentos difíciles; fue precisamente aquí donde conocí a mi novia Jana a la que agradezco el cariño y el apoyo que siempre mostró en estos años.

Finalmente decir que, como en toda etapa hay un antes y un después, siento que ahora soy una mejor persona, tanto en lo académico como en lo que se refiere al aspecto más humano, por lo que nunca voy a olvidar todo aquello que me hizo llegar a este momento.

En memoria de  
mis abuelos  
Federico y Petra.



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>3</b>
1.1. Control óptimo y teoría de juegos . . . . .	3
1.2. Los distintos conceptos de solución . . . . .	5
1.2.1. Soluciones óptimas en el sentido de Pareto . . . . .	6
1.2.2. Soluciones óptimas en el sentido de Nash . . . . .	7
1.3. Optimización multiobjetivo . . . . .	9
1.3.1. Métodos <i>a priori</i> . . . . .	9
1.3.2. Métodos progresivos . . . . .	10
1.3.3. Métodos <i>a posteriori</i> . . . . .	11
1.3.4. Métodos para estrategias no cooperativas . . . . .	12
1.4. Problemas de gestión medioambiental . . . . .	13
1.4.1. Descripción física de los problemas . . . . .	13
1.4.2. Formulación matemática de los problemas . . . . .	15
1.5. Esquema de la tesis . . . . .	19
<b>2. Análisis matemático</b>	<b>23</b>
2.1. Sistema de estado . . . . .	24
2.2. Funciones objetivo . . . . .	26
<b>3. Problema I</b>	<b>29</b>
3.1. Estudio no cooperativo: Equilibrio de Nash . . . . .	29
3.1.1. Equilibrio de Nash en problemas de control multiobjetivo . . . . .	29
3.1.2. Existencia de solución . . . . .	30
3.1.3. Condiciones de optimalidad . . . . .	33
3.1.4. Resolución numérica . . . . .	37
3.1.5. Resolución numérica alternativa: Aplicación directa de las sensibilidades . . . . .	43
3.2. Estudio cooperativo: Soluciones de Pareto . . . . .	48
3.2.1. Soluciones de Pareto en espacios de Banach: El método de pesos . . . . .	48

3.2.2.	Existencia de solución . . . . .	51
3.2.3.	Condiciones de optimalidad . . . . .	52
3.2.4.	Resolución numérica . . . . .	55
3.3.	Resultados Numéricos . . . . .	59
3.3.1.	Estudio no cooperativo: Equilibrio de Nash . . . . .	61
3.3.2.	Estudio cooperativo: Optimalidad de Pareto . . . . .	61
3.3.3.	Comparaciones . . . . .	67
<b>4.</b>	<b>Problema I (Discreto vs. Continuo)</b>	<b>73</b>
4.1.	Formulación matemática del problema discreto . . . . .	73
4.2.	Estudio no cooperativo: Equilibrio de Nash . . . . .	74
4.2.1.	Existencia de solución . . . . .	74
4.2.2.	Condiciones de optimalidad . . . . .	76
4.2.3.	Resolución numérica . . . . .	79
4.3.	Estudio cooperativo: Soluciones de Pareto . . . . .	81
4.3.1.	Existencia de solución y condiciones de optimalidad . . . . .	81
4.3.2.	Resolución numérica . . . . .	84
4.4.	Resultados Numéricos: Comparaciones . . . . .	85
<b>5.</b>	<b>Problema II</b>	<b>89</b>
5.1.	Una solución ecológicamente óptima . . . . .	90
5.2.	Soluciones de Pareto . . . . .	90
5.2.1.	Existencia de solución . . . . .	90
5.2.2.	Condiciones de optimalidad . . . . .	91
5.2.3.	Resolución numérica . . . . .	94
5.3.	Resultados Numéricos . . . . .	97
<b>6.</b>	<b>SOS: Una toolbox de simulación numérica para ayudar en la toma de decisiones relacionadas con la descarga de aguas residuales y su impacto medioambiental</b>	<b>109</b>
6.1.	Introducción . . . . .	109
6.2.	Organización de SOS . . . . .	110
6.3.	Ejecución de SOS . . . . .	115
<b>A.</b>	<b>SOS: Guía de usuario</b>	<b>123</b>
A.1.	Descripción de la toolbox . . . . .	123
A.2.	Ejecución de los distintos módulos de SOS . . . . .	124
A.3.	Cargar una sesión guardada en disco . . . . .	129

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Control óptimo y teoría de juegos

El transcurrir de la vida es una constante toma de decisiones en la que se busca alcanzar (o, al menos, mejorar) una serie de objetivos. Para ello pensamos en las consecuencias de cada decisión y, como es natural, deseamos siempre tomar la mejor entre las posibles. Así, decidimos la hora a la que nos levantamos, la ropa que nos ponemos, lo que desayunamos, etc. En muchos casos esa toma de decisiones se reduce a dejar actuar nuestro sentido común, la oportunidad o incluso la suerte, ya que no acarrear consecuencias graves.

Por supuesto, existen situaciones mucho más complejas en áreas muy diversas (Ingeniería, Biología, Economía, etc.) donde la toma de decisiones depende de diversos factores, buscando llegar a satisfacer múltiples objetivos. La dificultad radica en que, en muchas ocasiones, los objetivos son incompatibles y generan conflictos entre sí. Esto hace que la toma de decisiones no sea para nada algo trivial, siendo la aplicación de técnicas matemáticas avanzadas una herramienta de gran utilidad para un correcto funcionamiento del conjunto.

Como ejemplos más próximos tenemos los gobiernos y las grandes empresas que toman constantemente decisiones en busca de objetivos de muy diferente tipo (económico, social, medioambiental, etc.) y donde con gran frecuencia ocurre que la mejoría de uno de ellos supone, en determinadas situaciones, el empeoramiento de los otros.

En este tipo de situaciones la teoría clásica de optimización multiobjetivo puede llegar a ser una herramienta muy eficiente. Cuando se trata con problemas de optimización multiobjetivo la tendencia habitual es realizar una simple escalarización del problema, utilizando una combinación lineal con pesos de las funciones objetivo, a fin de aplicar las técnicas de optimización clásicas (para un único objetivo). Sin embargo, esta aproximación presenta ciertos inconvenientes: por una parte, la elección de los pesos es completamente arbitraria; por otra parte, a menudo se comparan valores de objetivos con escalas muy

disparos. En consecuencia, el óptimo (que carece de un significado preciso, en cuanto este depende de la función objetivo concreta considerada) puede depender de una manera dramática de un conjunto de decisiones arbitrarias. Por todas estas razones, la necesidad de una aproximación natural y sistemática para tratar los problemas de optimización multiobjetivo regidos por ecuaciones en derivadas parciales, ha llevado a replantear este tipo de problemas dentro del campo más general de la teoría de juegos diferenciales [64].

Esbozamos a continuación un marco básico para la formulación como juegos diferenciales de los problemas de optimización multiobjetivo regidos por ecuaciones en derivadas parciales. Un juego diferencial involucra los siguientes elementos:

- Un conjunto de  $n$  jugadores  $I = \{1, \dots, n\}$ .
- Un vector de controles  $u = (u_1, \dots, u_n)^T$ , donde cada control  $u_i$  pertenece a un conjunto de controles admisibles  $U_i$  para el jugador  $i$ .
- Un vector de variables de estado  $x = (x_1, \dots, x_p)^T$  perteneciente al espacio de estados  $X$ , cuya evolución está regida por un sistema de ecuaciones en derivadas parciales (de ahí el nombre de juego diferencial), conocido como sistema de estado.
- Una función objetivo  $J_i(u)$  propia de cada jugador  $i$ .
- Una estrategia para cada jugador. Así, para el jugador  $i \in I$ , una estrategia  $\phi_i$  es una regla de decisión, elegida del conjunto de decisiones posibles, que selecciona una acción en función de la información disponible.

Esta nueva situación hace que el objetivo de cada jugador dependa fuertemente de las elecciones de los otros. Mientras que en el caso de la optimización clásica de un único objetivo el significado de solución óptima se presenta claro y sin ambigüedades, en el caso de problemas de decisión con varios jugadores, las respuestas óptimas (tanto colectiva como individualmente) dependen del modo de juego, esto es, de si los jugadores cooperan entre sí o no lo hacen así. Esto conduce a que podamos considerar distintos conceptos de solución óptima. A continuación presentaremos brevemente los tres tipos de solución más habituales: el equilibrio de Nash, la solución de Stackelberg y el óptimo-Pareto.

En primer lugar, si suponemos que los jugadores no cooperan entre sí y prefieren una solución segura, entonces se considera el concepto de equilibrio de Nash [65]: una situación en la que la decisión de cada jugador es óptima respecto a las decisiones de todos los demás.

La solución de Stackelberg [77] para un juego de dos jugadores supone que los roles de los jugadores (es decir, la información disponible para cada uno de ellos) están jerarquizados: hay un líder y un seguidor (el contexto puede ser fácilmente ilustrado por una situación donde el líder conoce el criterio del seguidor, pero este ignora el criterio que seguirá el líder). La solución de Stackelberg está pensada para que el líder optimice

su estrategia, pero teniendo en cuenta, simultáneamente, las respuestas racionales del seguidor. De hecho, el líder es el único que toma decisiones en este tipo de juego.

Finalmente, se habla de soluciones óptimas-Pareto [66] cuando se permiten el intercambio de información y la cooperación entre los jugadores. En este caso, calcular el conjunto de óptimos-Pareto es equivalente a resolver un problema con un único control y una función objetivo vectorial. Los elementos que pertenecen al conjunto de óptimos-Pareto se pueden caracterizar resolviendo una familia de problemas de control óptimo clásico donde la función de coste escalar se obtiene a partir de una suma con pesos de los criterios individuales de cada uno de los jugadores.

Dentro del escaso número de trabajos previos sobre el control multiobjetivo de ecuaciones en derivadas parciales, algunos que podemos destacar son los de Lions [53, 54, 55] (sobre las estrategias de Pareto y Stackelberg), Bristeau *et al.* [20] (estrategias de Pareto y Nash), Ramos *et al.* [70, 71] (estrategia de Nash), Díaz y Lions [32] (estrategia de Stackelberg-Nash), Bahaa [16] (estrategia de Pareto), Tang *et al.* [78] (estrategia de Nash), o Ramos y Roubicek [72] (estrategia de Nash).

## 1.2. Los distintos conceptos de solución

En esta sección, y continuando con lo ya comentado en la sección previa, intentaremos dar una presentación más detallada de los distintos conceptos de solución que se utilizarán a lo largo de esta tesis, en concreto, las soluciones óptimas en el sentido de Pareto y en el sentido de Nash.

Un problema de optimización multiobjetivo en forma estándar puede enunciarse como:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } J(u) = (J_1(u), \dots, J_n(u))^T \\ \text{sujeto a } u \in U \end{cases} \quad (1.1)$$

donde  $J_i : U \rightarrow \mathbb{R}$ , para  $i = 1, \dots, n$ , son los funcionales objetivo,  $u = (u_1, \dots, u_m)^T$  es el vector de variables de decisión (controles),  $U = U_1 \times \dots \times U_m$  es la región de decisiones (controles) admisibles, y  $J(u)$  se conoce como la función de evaluación [27].

Obviamente la solución ideal del problema (1.1) vendría dada por un vector  $u^I = (u_1^I, \dots, u_m^I)^T$  que permitiese a cada funcional objetivo llegar a su óptimo, es decir,

$$J_i(u^I) = \min_{u \in U} J_i(u), \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

A ese vector  $u^I$  se le conoce como *solución ideal* (o *solución utópica*) del problema (1.1).

En la práctica, los funcionales objetivo  $J_i$  suelen entrar en conflicto entre sí, y la solución ideal raras veces existe. En esos casos - la mayoría - es necesario introducir un nuevo concepto que nos diga que decisión es la mejor, es decir, un concepto de *óptimo* (o de *optimalidad*) para el problema (1.1).

Como ya comentamos en la sección anterior, en el caso de problemas multicriterio, las soluciones óptimas dependen del modo de juego, esto es, de si los jugadores cooperan entre sí (dando origen a los óptimos-Pareto para el ámbito cooperativo) o de si no existe cooperación entre los jugadores (apareciendo el concepto de equilibrio de Nash en el contexto no cooperativo).

### 1.2.1. Soluciones óptimas en el sentido de Pareto

La noción de *óptimo-Pareto* comúnmente aceptada es la originariamente propuesta por Francis Ysidro Edgeworth [34], y posteriormente generalizada por Vilfredo Pareto [66]. Dentro de este contexto cooperativo, se considera como óptimo a aquel vector de variables de decisión que sea capaz de hacer que ninguno de los funcionales objetivo pueda mejorar sin tener que perjudicar, por lo menos, a alguno de los otros. Esto se define más formalmente a continuación:

**Definición 1** *Un vector de decisión  $u^* \in U$  es un óptimo-Pareto (global) si no existe otro vector de decisión  $u \in U$  tal que  $J_i(u) \leq J_i(u^*)$  para todo  $i = 1, \dots, n$ , y  $J_k(u) < J_k(u^*)$  para al menos un índice  $k \in \{1, \dots, n\}$ .*

La definición anterior se puede enunciar también en términos de dominancia:

**Definición 2** *Un vector  $x = (x_1, \dots, x_n)^T$  se dice que domina a otro vector  $y = (y_1, \dots, y_n)^T$  (denotado por  $x \preceq y$ ) si y sólo si  $x$  es parcialmente menor que  $y$ , esto es, para todo  $i \in \{1, \dots, n\}$ , se cumple  $x_i \leq y_i$ , y además existe  $k \in \{1, \dots, n\}$  tal que  $x_k < y_k$ .*

En base a esto, podemos dar la siguiente definición equivalente de óptimo-Pareto (que también recibe en la literatura matemática los nombres de *solución no dominada* o de *solución eficiente*):

**Definición 3** *Un vector de decisión  $u^* \in U$  es un óptimo-Pareto si no existe ningún otro vector de decisión  $u \in U$  tal que  $J(u) \preceq J(u^*)$ .*

Por otra parte, teniendo en cuenta que el óptimo-Pareto no es necesariamente único, surge la siguiente definición:

**Definición 4** *Para el problema de optimización multiobjetivo (1.1), se define el conjunto de óptimos-Pareto  $\mathcal{P}^*$  como*

$$\mathcal{P}^* = \{u^* \in U : \nexists u \in U / J(u) \preceq J(u^*)\}$$

Al ser evaluados los elementos de  $\mathcal{P}^*$  (esto es, al calcular  $J(\mathcal{P}^*)$ ), obtenemos los elementos de otro conjunto, el llamado frente Pareto, el cual es de vital importancia para la toma de decisiones:

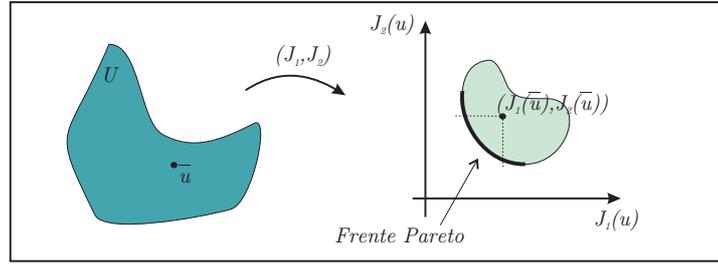


Figura 1.1: Ejemplo de Frente Pareto con dos objetivos.

**Definición 5** Dado el problema de optimización multiobjetivo (1.1) y su conjunto de óptimos-Pareto  $\mathcal{P}^*$ , el frente Pareto  $\mathcal{FP}^*$  se define como

$$\mathcal{FP}^* = \{v = J(u) : u \in \mathcal{P}^*\}$$

Claramente, los elementos de  $\mathcal{FP}^*$  son no dominados con respecto a los otros elementos de la región  $J(U)$ .

Otras definiciones relacionadas, como las de óptimo-Pareto local, óptimo-Pareto débil u óptimo-Pareto  $\varepsilon$ -aproximado, pueden ser vistas, por ejemplo, en [25]; pero no serán presentadas aquí dado que, al ser nuestros problemas de naturaleza convexa, los óptimos-Pareto serán globales.

Por otra parte conviene destacar que, en la mayoría de los casos, existe una infinidad de óptimos-Pareto, por lo que no es posible obtener todos los elementos de  $\mathcal{P}^*$  ni, consecuentemente, todos los elementos de  $\mathcal{FP}^*$ . En la práctica lo que se hace es calcular un número “suficiente” de óptimos-Pareto (de puntos de  $\mathcal{P}^*$ ) y, a partir de ellos, generar una parte “representativa” del frente Pareto  $\mathcal{FP}^*$ . Volveremos a retomar este comentario más adelante, cuando abordemos la resolución numérica de nuestro problema de control multiobjetivo.

Finalmente resaltar que el concepto de óptimo-Pareto está íntimamente ligado a los juegos cooperativos: un esquema cooperativo consiste en llegar a acuerdos entre los jugadores sobre qué estrategias van a tomar antes de comenzar el juego, con la intención de incrementar las ganancias para todos. Ese es exactamente el concepto que subyace en la definición de óptimo-Pareto: una estrategia no será óptimo-Pareto si hay alguna otra que mejora las ganancias de todos los jugadores.

### 1.2.2. Soluciones óptimas en el sentido de Nash

Existen a menudo situaciones diferentes a las propiamente cooperativas, en donde detrás de la persecución de cada objetivo existe un gestor (tomador de decisiones) distinto que, naturalmente, tiene un total interés en su propio beneficio y no en el de los demás

jugadores. Lo anterior puede ejemplificarse de manera sencilla en una crisis económica mundial como la que estamos sufriendo actualmente: todos los países afectados se preocupan por la economía, pero cada uno de ellos toma las decisiones sobre la suya propia y, además, su preocupación fundamental es reactivar la economía de su país, no la de los demás.

Este tipo de problemas se suele formular de manera clásica, dentro de la teoría de juegos, como aquella situación en la que ante un problema común (juego) son varios gestores (jugadores) los que deben tomar sus propias decisiones - de forma independiente, simultánea y desconociendo las decisiones de los otros jugadores - en busca de sus objetivos particulares.

De acuerdo a lo anterior podemos pensar que la función de evaluación  $J(u)$  en (1.1) representa un juego donde, de manera implícita, detrás de cada uno de los funcionales objetivo  $J_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , existe un jugador (o tomador de decisiones), cuyo espacio de estrategias es  $U_i$  y cuya ganancia vendrá dada por el funcional  $J_i(u)$ ,  $u \in U$ . Por tanto, el número de jugadores  $n$  y el número de espacios de estrategias  $m$  debe coincidir en este caso, esto es, un juego diferencial sólo puede formularse cuando  $m = n$ .

Un juego no cooperativo consiste entonces en que cada jugador mira por su propio interés, aunque consciente de las capacidades de los demás jugadores. En consecuencia, la posible estrategia de cada jugador influye (en mayor o menor medida) sobre las estrategias a adoptar por los demás jugadores, es decir, cada jugador induce a los demás a coordinar estrategias.

Para llegar a una solución en esta situación no cooperativa recurrimos a la teoría del *equilibrio de Nash* [64]:

**Definición 6** *Un vector de decisión  $u^* = (u_1^*, \dots, u_n^*)^T \in U$  es un equilibrio de Nash si, para todo  $i = 1, \dots, n$ , se satisface*

$$J_i(u_1^*, \dots, u_{i-1}^*, u_i^*, u_{i+1}^*, \dots, u_n^*) \leq J_i(u_1^*, \dots, u_{i-1}^*, u_i, u_{i+1}^*, \dots, u_n^*) \quad (1.2)$$

para todo  $u_i \in U_i$ .

De acuerdo a la definición anterior, el tomador de decisiones correspondiente a  $J_i$  busca tomar la mejor decisión a su alcance  $u_i^* \in U_i$ , ya que supone que todos los otros harán lo mismo (elegir las mejores decisiones  $u_j^*$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$ ,  $j \neq i$ ).

Entonces, si todo marcha de acuerdo a lo planteado en el contexto no cooperativo anterior, todos llegarán a una situación en donde  $u^* = (u_1^*, \dots, u_n^*)^T \in U$  representa su mejor decisión, es decir, llegarán a un punto de equilibrio entre todas las partes, que ninguno de ellos deberá romper unilateralmente, ya que su ganancia particular se vería perjudicada.

### 1.3. Optimización multiobjetivo

Llegados a este punto es importante distinguir dos elementos del proceso de la optimización multiobjetivo, claramente diferenciados y con unos cometidos completamente distintos:

1. En primer lugar están las diversas técnicas o métodos que existen en matemáticas para la optimización multiobjetivo en sí, es decir, la parte *analítica* (o *matemática*) representada por un *analista* (que puede ser una persona, un grupo de personas o incluso un software interactivo).
2. En segundo - y no menos importante - lugar está el concepto del *tomador de decisiones* (*decision maker*, en terminología anglosajona). El tomador de decisiones juega el papel de gestor (que dirige el proceso de optimización aunque no lo implementa). Además, como su nombre indica, está facultado para la toma de decisiones en base a diversos factores (experiencia, conocimiento del problema, liderazgo, etc.). El tomador de decisiones puede intervenir (comunicando y haciendo valer sus intereses) antes, durante o después de la fase analítica de la optimización.

Todas estas consideraciones previas dan lugar a una clasificación en donde se encuentran contenidas las diversas técnicas o métodos de la optimización multiobjetivo [28]:

- Métodos *a priori* (decisión  $\Rightarrow$  optimización).
- Métodos progresivos (decisión  $\iff$  optimización).
- Métodos *a posteriori* (optimización  $\Rightarrow$  decisión).

#### 1.3.1. Métodos *a priori*

En los métodos *a priori*, el tomador de decisiones debe especificar sus preferencias, esperanzas y opiniones antes del inicio del proceso de optimización por parte del analista. El problema radica en que el tomador de decisiones suele desconocer la magnitud del problema y, en consecuencia, la viabilidad de sus expectativas.

Entre los métodos *a priori* comentaremos brevemente los métodos de función de utilidad, el método de ordenación lexicográfica, y la programación por metas.

En los *métodos de función de utilidad* el tomador de decisiones debe suministrar una función escalar que represente sus preferencias globalmente. Un caso particularmente interesante es el de las funciones de agregación lineal, que se expresan como una combinación lineal de las funciones objetivo, donde la importancia relativa de cada una de ellas se mide a través de los pesos correspondientes.

Los métodos de función de utilidad son métodos excelentes si el tomador de decisiones conoce una formulación matemática explícita para la función de utilidad, y siempre que esa función represente completamente las preferencias del tomador de decisiones.

En el *método de ordenación lexicográfica* los objetivos se jerarquizan de acuerdo a un orden de importancia definido por el tomador de decisiones. La solución buscada se obtiene minimizando las funciones objetivo, empezando por la más importante. Si este problema tiene una única solución, esta es la solución buscada. En otro caso, la segunda función objetivo se minimiza, añadiendo una restricción a las originales. Esta nueva restricción garantiza que la función objetivo más importante preserve su valor óptimo. Si este nuevo problema tiene solución única, esta será la solución buscada. En caso contrario, se repite el proceso anterior hasta obtener la solución.

La justificación práctica para el uso del método de ordenación lexicográfica es su simplicidad y el hecho de que en el mundo real las decisiones suelen tomarse de manera sucesiva. Sin embargo, esta técnica sólo es recomendable cuando se conoce perfectamente el orden de importancia de los distintos objetivos.

La idea básica de la *programación por metas* reside en que el tomador de decisiones especifique unos niveles de aspiración para las funciones objetivo, y que cualquier desviación de esos niveles de aspiración sea minimizada (bien utilizando pesos o bien mediante restricciones).

Esta técnica puede ser muy eficiente desde el punto de vista computacional, siempre que conozcamos claramente las metas que se desean obtener, y que estas se encuentren dentro de la región admisible.

### 1.3.2. Métodos progresivos

Los métodos progresivos (también conocidos en la literatura como métodos interactivos) podrían producir mejores soluciones, ya que consisten en la continua interacción del tomador de decisiones con el analista. Esto da lugar a correcciones sucesivas sobre la generación y evaluación de soluciones óptimas, haciendo que la optimización se aproxime cada vez más a las expectativas planteadas. Así, podemos pensar que estos métodos son gobernados por el siguiente proceso iterativo [62]

- Hallazgo de una primera solución admisible.
- Interacción con el tomador de decisiones.
- Obtención de una nueva solución: si la nueva solución es aceptable para el tomador de decisiones, se detiene el proceso; en caso contrario, se vuelve al paso anterior.

Sin embargo, todo el proceso anterior puede verse dificultado en el caso de que el tomador de decisiones no tenga disponibilidad de tiempo, carezca de los conocimientos

de matemáticas necesarios para su entendimiento con el analista, o existan desacuerdos entre ellos.

Entre los numerosos métodos de tipo progresivo podemos destacar el *método de Geofrion* (el más antiguo de todos, pues data ya de 1972), el *método* de paso *STEM* (STEP Method), o el más reciente *método ISTM* (Interactive Step Trade-off Method). Un análisis detallado de estos (y otros) métodos progresivos pueden verse, por ejemplo, en [76]. Un interesante estudio comparativo de los pros y contras en la utilización de estos métodos puede encontrarse en [63].

### 1.3.3. Métodos *a posteriori*

Por último, en cuanto a los métodos *a posteriori* (o métodos generadores de óptimos-Pareto [62]), estos parten de generar el conjunto  $\mathcal{P}^*$  (o, como ocurrirá en la práctica, sólo una parte representativa de él), y posteriormente realizar su evaluación, es decir, generar el frente Pareto  $\mathcal{FP}^*$ . En base a este resultado, el tomador de decisiones elige a uno sólo de los elementos de  $\mathcal{P}^*$  como la solución del problema de optimización multiobjetivo (1.1), aquel que más se ajusta a sus propias necesidades.

Entre todos los métodos *a posteriori* destacan dos que se usan muy frecuentemente, tanto para resolver problemas prácticos como para desarrollar otros métodos más sofisticados. Estos dos métodos destacados son el método de pesos (o método de ponderación) y el método de  $\varepsilon$ -restricciones.

En el *método de pesos* se asocia a cada funcional objetivo un coeficiente de ponderación, y se minimiza la suma ponderada de los objetivos. Este proceso se repite para distintos valores de los pesos, con el fin de localizar múltiples puntos del frente Pareto. Este método - uno de los más populares entre la comunidad científica - es simple y eficiente desde un punto de vista computacional, pero las distintas escalas de los objetivos pueden hacer difícil la selección adecuada de los pesos para asegurar que los óptimos-Pareto estén bien distribuidos (y no acumulados en una zona limitada). Para corregir esto, pueden construirse sumas ponderadas, utilizando la norma  $p$  [58] en lugar de la norma 1, lo que permite acceder a un mayor número de óptimos-Pareto.

En cambio, en el *método de  $\varepsilon$ -restricciones* se selecciona uno de los objetivos a minimizar (el más significativo), y el resto de los objetivos se reformulan como restricciones acotadas por ciertos niveles permisibles  $\varepsilon_k$ . Es decir, se efectúa una minimización de un solo funcional sujeto a restricciones adicionales correspondientes a los otros objetivos. Cambiando las cotas  $\varepsilon_k$  de estas restricciones se obtienen distintos óptimos-Pareto, que permiten generar el frente Pareto.

La desventaja de estos dos métodos, así como de otros métodos de escalarización, es que variar los parámetros de manera consistente y continua no llega para asegurar la obtención de una buena distribución de óptimos-Pareto y, por ende, una representación

completa y ajustada del frente Pareto. Por ejemplo, Das y Dennis [29] han observado que una distribución uniforme de pesos no proporciona una descripción uniforme del frente Pareto. Varias medidas posibles de la calidad de aproximación del frente Pareto pueden ser vistas, por ejemplo, en [74]. Más recientemente, técnicas de escalarización adaptativa, donde los parámetros de escalado se eligen de manera automática en el curso del algoritmo de forma que una cierta calidad de aproximación se mantenga, han sido propuestos por diferentes autores [46, 35].

Como alternativa, otros tipos de algoritmos sin escalarización han sido desarrollados en los últimos tiempos: algunos son extensiones de algoritmos de optimización escalar (como el algoritmo de máximo descenso [37, 43] o el método de Newton [36], con convergencia al menos lineal), mientras que otros se basan en conceptos de optimización heurística [50].

Por último, el uso de algoritmos evolutivos para resolver problemas multiobjetivo ha sido motivado principalmente por el carácter basado en la población de esos métodos, que permite la generación de varios óptimos-Pareto en una única ejecución. El primer intento real para extender un algoritmo evolutivo a problemas multiobjetivo fue el algoritmo *VEGA* (Vector Evaluated Genetic Algorithm) desarrollado por Schaffer [75] en 1985. Otros algoritmos evolutivos que aparecieron con posterioridad fueron *MOGA* (Multiple Objective Genetic Algorithm), *NSGA* (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm) o *NPGA* (Niche Pareto Genetic Algorithm). Una pormenorizada revisión de estas estrategias evolutivas puede verse, por ejemplo, en [27].

#### 1.3.4. Métodos para estrategias no cooperativas

Todos los métodos que hemos mencionado hasta ahora (tanto *a priori*, como progresivos y *a posteriori*) son utilizados para el cálculo de soluciones óptimas dentro de las estrategias de tipo cooperativo, esto es, para la determinación de óptimos-Pareto. Para el caso del cálculo de equilibrios de Nash, el catálogo de métodos utilizables es muy variado.

El cálculo de un equilibrio de Nash puede formularse como un problema de punto fijo o un problema de complementareidad no lineal y, en consecuencia, resolverse con las técnicas correspondientes a este tipo de problemas. Existe una gran variedad de métodos para resolver problemas de complementareidad. Entre otros, podemos destacar los siguientes posibles:

- extensiones del método de Newton para ecuaciones no lineales [45],
- métodos de búsqueda de línea [33] que usan una generalización de las técnicas de búsqueda lineal,
- algoritmos basados en programación cuadrática [38] que deriva extensiones de métodos de Gauss-Newton,

- métodos de descenso basados en optimización diferenciable [57] que reformulan la complementareidad como una ecuación no lineal,
- métodos proximales y de proyección [15] que generalizan los métodos de gradiente proyectado,
- técnicas de regularización [24] que reemplazan las ecuaciones no regulares por aproximaciones diferenciables,
- métodos de puntos interiores [48] basados en sustituir las desigualdades por penalizaciones internas, etc.

Por otra parte, el problema de encontrar un equilibrio de Nash también puede formularse de manera alternativa como la búsqueda de un óptimo global de una función sobre un polítopo. Esta reformulación del problema permite considerar la amplia gama de algoritmos de optimización estocástica para detectar equilibrios de Nash. Así, entre otras, pueden utilizarse las técnicas de *CMAES* (Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy), *PSO* (Particle Swarm Optimization) o *DE* (Differential Evolution). Detalles de estas técnicas pueden verse en [67, 30] y las referencias allí incluidas.

## 1.4. Problemas de gestión medioambiental

### 1.4.1. Descripción física de los problemas

Dentro de la problemática relacionada con la mejora y conservación del Medio Ambiente, uno de los aspectos que despierta mayor interés es el relacionado con la gestión, tratamiento y eliminación de todo tipo de residuos. En este tema, mención especial reciben las aguas residuales que, de tipo doméstico o industrial y más o menos tratadas, acaban siendo vertidas al mar, de modo directo en las zonas costeras y a través de ríos en las zonas de interior.

La capacidad del mar para aceptar estos vertidos es limitada, por lo que es necesario que, de modo previo a su descarga, las aguas residuales sean tratadas, química y/o biológicamente, para reducir su carga contaminante. Estos tratamientos, a la par de necesarios, pueden ser muy costosos, y su gestión involucra aspectos no sólo ecológicos sino también económicos. El problema se agrava aún más en aquellos casos, la mayoría, en los que en una misma zona (pongamos un lago, una ría, un estuario, etc.) se vierten aguas residuales procedentes de varias plantas depuradoras, cada una de ellas gestionada por un organismo diferente (ya sean industrias, ayuntamientos, etc.).

El diseño de una gestión adecuada en esta situación es el objetivo final de este trabajo. Para ello vamos a suponer (ver figura 1.2) la existencia de un dominio  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  ocupado por aguas poco profundas (una ría, un lago, un estuario, etc.) en el que se vierten, a través

de emisarios submarinos, aguas residuales procedentes de un cierto número de plantas depuradoras. El aspecto económico del problema lo tendremos en cuenta partiendo de que para cada planta conocemos el gasto del tratamiento en función de la depuración realizada. Desde el punto de vista ecológico, admitiremos que en el dominio  $\Omega$  existen unas determinadas zonas (identificadas con playas, viveros, etc.) en las que es preciso garantizar la calidad del agua con niveles de polución por debajo de unas cotas máximas prefijadas.

Nuestro objetivo central en esta tesis es realizar un análisis detallado y completo para que uno o varios gestores (tomadores de decisiones) determinen cual debe ser la estrategia de depuración en cada planta, que garantice la calidad del agua en las distintas zonas con el menor esfuerzo económico posible.

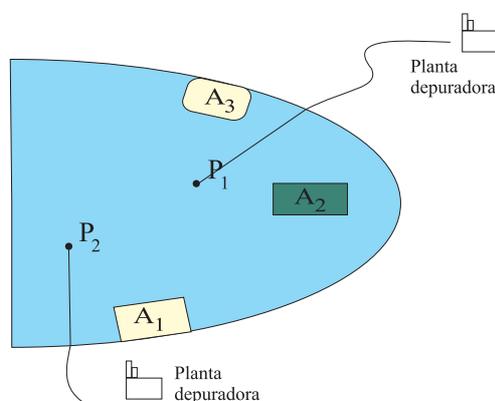


Figura 1.2: Ejemplo de dominio  $\Omega$ .

Debe destacarse aquí que - siempre desde el punto de vista clásico (con una única función objetivo escalar) del control óptimo de ecuaciones en derivadas parciales - en la última década han sido numerosos los trabajos donde se tratan problemas relacionados con el tema. Así, se puede destacar el estudio de los niveles óptimos de depuración en vertidos de aguas residuales (tanto desde el punto de vista analítico como numérico) [59, 60, 61], o la determinación de la localización óptima de los emisarios submarinos conectados a las plantas de depuración de aguas residuales [11, 12]. (Una optimización conjunta de ambos aspectos ha sido llevada a cabo recientemente en [1]). La purificación óptima de regiones de aguas especialmente contaminadas ha sido analizada y resuelta numéricamente - también desde el punto de vista del control óptimo - en [7, 8]. Finalmente, un enfoque más divulgativo y general del tema puede ser visto, por ejemplo, en los artículos de revisión [2, 13]. Sin embargo, hasta donde nosotros sabemos, el control óptimo multiobjetivo de ecuaciones en derivadas parciales dentro del ámbito de la conservación y mejora del Medio Ambiente es un campo completamente inexplorado. De hecho, y tal como ya hemos co-

mentado al inicio de este capítulo, es muy reducido el número de trabajos que analizan problemas de control óptimo multiobjetivo de ecuaciones en derivadas parciales aplicados a cualquier ámbito científico.

### 1.4.2. Formulación matemática de los problemas

Consideremos un dominio acotado  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  (ver figura 1.2) ocupado por aguas poco profundas, en el que  $N_E$  plantas depuradoras vierten - después de tratarlas - aguas residuales a través de sus correspondientes emisarios submarinos ubicados en los puntos  $P_j \in \Omega$ ,  $j = 1, \dots, N_E$ . Supongamos además que en el dominio  $\Omega$  existen ciertas zonas a proteger ( $A_i \subset \Omega$ ,  $i = 1, \dots, N_Z$ ), en las que se busca que la calidad del agua sea *buena*, en el sentido de la contaminación sea inferior a unos umbrales máximos permitidos.

El primer paso a la hora de introducir una formulación matemática del problema es elegir un *indicador* adecuado para medir la calidad del agua y establecer un modelo que, en función de los vertidos realizados, permita simular la concentración de ese indicador en todo el dominio  $\Omega$  a lo largo de todo el intervalo de tiempo que se desea simular. Suponiendo que los vertidos realizados son de tipo doméstico, escogemos como indicador de calidad de agua las bacterias *coliformes fecales* (CF), que son unas de las bacterias con mayor presencia en ese tipo de vertidos.

La evolución de la concentración de CF en un dominio  $\Omega$  ocupado por aguas poco profundas y a lo largo de un intervalo de tiempo  $(0, T)$  viene dada por (ver, por ejemplo, [7]):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho - \beta \Delta \rho + \kappa \rho &= \frac{1}{h} \sum_{j=1}^{N_E} m_j(t) \delta(x - P_j) && \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \rho(x, 0) &= \rho_0(x) && \text{en } \Omega, \\ \frac{\partial \rho}{\partial n} &= 0 && \text{sobre } \partial \Omega \times (0, T), \end{aligned} \right\} \quad (1.3)$$

donde:

- el *estado*  $\rho(x, t)$  es la concentración de CF, promediada en altura, en el punto  $x \in \Omega$  y en el instante de tiempo  $t \in (0, T)$ ,
- $h \in C(\bar{\Omega} \times [0, T])$  es la altura del agua, que se supone verifica la hipótesis estándar  $h(x, t) \geq \alpha > 0$ ,  $\forall (x, t) \in \bar{\Omega} \times [0, T]$
- $\vec{u} \in [L^\infty(0, T; W^{1,\infty}(\Omega))]^2$  es la velocidad horizontal del agua, también promediada en altura,

- $\beta > 0$  es el coeficiente de viscosidad horizontal, que tiene en cuenta efectos turbulentos y de dispersión vertical,
- $\kappa \in \mathbb{R}$  es un coeficiente experimental relacionado con la mortalidad de CF,
- $m_j \in L^\infty(0, T)$  es el flujo de CF vertido en el punto  $P_j$ ,
- $\delta(x - P_j)$  representa la *medida de Dirac* en el punto  $P_j$ ,
- $\rho_0 \in C(\bar{\Omega})$  proporciona la concentración de CF en el momento de comenzar la simulación ( $t = 0$ ).

En el modelo anterior (1.3) - al que nos referiremos a partir de ahora como *sistema de estado* - cada planta depuradora tiene un *control* asociado. En efecto, la gestión del proceso de depuración consiste en determinar la reducción de polución que debe hacerse en cada planta, es decir, determinar la cantidad de CF que finalmente debe ser descargada por cada emisario. De este modo, el control asociado a la planta  $j$ -ésima es la función  $m_j(t)$ . Definimos pues como variable de control  $m = (m_1, \dots, m_{N_E})^T$  y consideramos el estado  $\rho$  dependiendo del control  $m$  ( $\rho \equiv \rho(m)$ ).

Si denotamos por  $\bar{m}_j$  el máximo flujo de CF que llega a la  $j$ -ésima planta, y por  $\underline{m}_j > 0$  el flujo mínimo de CF descargado en  $P_j$  (correspondiente con la máxima depuración posible en esa planta), tendremos que  $\underline{m}_j \leq m_j(t) \leq \bar{m}_j$ . Definimos pues

$$M_j = \{m \in L^\infty(0, T); 0 < \underline{m}_j \leq m(t) \leq \bar{m}_j, \text{ c.p.d. en } (0, T), \}$$

como el espacio de decisiones (controles) admisibles de la  $j$ -ésima planta y, consecuentemente, tomamos como espacio de vectores de decisión  $M = M_1 \times \dots \times M_{N_E}$ .

En cuanto al aspecto puramente económico del problema, admitimos que el coste de la depuración en la  $j$ -ésima planta es conocido y función de la cantidad de CF que, tras pasar el proceso de depuración, es descargada por el emisario correspondiente. Conviene observar que, aunque la función coste puede variar de una planta a otra debido a multitud de razones (tecnología y ubicación de la planta y del emisario, tipo de aguas residuales que recibe, etc.), existen tres circunstancias que la caracterizan perfectamente (ver figura 1.3):

- Cuanto menor es la cantidad de CF descargada por el emisario, mayor ha sido su depuración y por consiguiente mayor el coste.
- La depuración total no es factible.
- Siempre existe un coste mínimo (coste de mantenimiento y amortización), aún cuando no se realiza ninguna depuración.

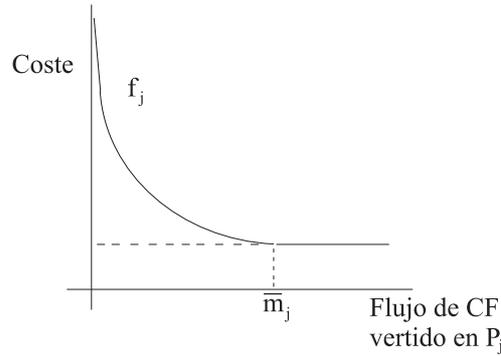


Figura 1.3: Forma estándar de la función de coste en una planta depuradora.

Se supone además que esa función  $f_j$ , que da el coste del tratamiento en la planta  $j$ -ésima, es continua en  $[\underline{m}_j, \bar{m}_j]$  y estrictamente convexa en este intervalo.

Así, el coste por el proceso de depuración para la  $j$ -ésima planta estará dado por:

$$\int_0^T f_j(m_j(t)) dt. \quad (1.4)$$

Por otra parte, si la depuración en la  $j$ -ésima planta no es suficiente y la concentración de CF en una de las zonas a proteger es más grande que el umbral máximo permitido (denotado por  $\sigma_i$  para la zona  $A_i$ ), una multa es impuesta. Se asume que la cantidad de la multa es función creciente (cuadrática) de la concentración extra de CF. Bajo esa hipótesis, la multa por depuración insuficiente en la zona  $\bar{A}_i$  estará dada por:

$$\frac{1}{2\epsilon_i} \int_{\bar{A}_i \times (0, T)} (\rho(x, t) - \sigma_i)_+^2 dx dt, \quad (1.5)$$

donde

- $\epsilon_i > 0$ ,  $i = 1, 2, \dots, N_Z$  es un parámetro de penalización que mide la *necesidad* de que se cumplan los requerimientos impuestos sobre la calidad del agua en la zona  $\bar{A}_i$ .
- $(\rho(x, t) - \sigma_i)_+$  es la *parte positiva* de  $(\rho(x, t) - \sigma_i)$ , esto es,

$$(\rho(x, t) - \sigma_i)_+ = \max\{\rho(x, t) - \sigma_i, 0\}$$

Pueden ahora surgir distintas situaciones que lleven a diferentes combinaciones entre los costes puramente económicos (1.4) y los de tipo ecológico (1.5). Esas combinaciones dan lugar a objetivos diferentes y, consecuentemente, problemas diferentes. En este trabajo estudiamos dos de ellos.

## I. Diferentes gestores con objetivos particulares

Supongamos en primer lugar que cada una de las plantas está gestionada por un organismo diferente (un ayuntamiento, una industria, ...). Supongamos además que cada planta tiene asignado el cuidado de un determinado número de zonas. Más en detalle, que las zonas están numeradas de modo que, para valores conocidos  $0 = n_0 < n_1 < \dots < n_{N_E} = N_Z$ , la planta  $j$ -ésima tiene a su cargo las zonas contenidas en  $\cup_{i=n_{(j-1)+1}}^{n_j} A_i$ .

Como es natural, el gestor de la  $j$ -ésima planta, para  $j = 1, \dots, N_E$ , deseará minimizar la suma de todos los costes (tanto los debidos al proceso de depuración como los generados por multas provocadas por depuración insuficiente). Así, la función objetivo para la  $j$ -ésima planta vendrá dada por:

$$J_j(m_1, \dots, m_{N_E}) = \int_0^T f_j(m_j(t)) dt + \sum_{i=n_{(j-1)+1}}^{n_j} \frac{1}{2\epsilon_i} \int_{\bar{A}_i \times (0, T)} (\rho(x, t) - \sigma_i)_+^2 dx dt, \quad (1.6)$$

lo que nos lleva a plantear el siguiente problema de optimización multiobjetivo:

**PROBLEMA I :** Encontrar la función  $m(t) = (m_1(t), \dots, m_{N_E}(t))^T \in M$  que minimice el funcional  $J_j(m)$  dado en (1.6), para todo  $j = 1, \dots, N_E$ , siendo  $\rho(x, t)$  la solución del sistema de estado (1.3).

En notación compacta se escribe como:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } J(m) \\ \text{sujeto a } m \in M, \end{cases} \quad (1.7)$$

donde la función de evaluación  $J : M \longrightarrow \mathbb{R}^{N_E}$  viene dada por  $J(m) = (J_1(m), \dots, J_{N_E}(m))^T$ .

**Nota 1** *La situación habitual es que cada una de las zonas a proteger esté controlada por una y sólo una planta, de manera que, como hemos indicado previamente  $n_{N_E} = N_Z$ . En el caso de que una zona esté al cargo de varias plantas (situación que también se admite en nuestro estudio), es necesario una reenumeración en la que a esa zona se le asignen varios subíndices (tantos como plantas que la controlen) y, en ese caso, se tendrá  $n_{N_E} > N_Z$ .*

## II. Un único gestor con diferentes objetivos

Una situación diferente es aquella en la que un único organismo (Ayuntamiento, Comunidad autónoma...) gestiona todas las plantas. En ese caso se tiene la posibilidad de

estudiar por separado objetivos puramente económicos de objetivos económico-ecológicos. Es más, los gastos por depuración de todas las plantas pueden ser sumados, ya que sólo el coste final interesa, sin embargo, los derivados de la contaminación deben separarse por zonas, pues criterios diferentes del puramente económico (criterios ecológicos, políticos, ...) pueden ser decisivos a la hora de que el gestor elija entre todas las soluciones óptimas.

Atendiendo a lo anterior, definimos los funcionales objetivo

$$K_C(m_1, \dots, m_{N_E}) = \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T f_j(m_j(t)) dt, \quad (1.8)$$

$$K_i(m_1, \dots, m_{N_E}) = \frac{1}{2\epsilon_i} \int_{\bar{A}_i \times (0, T)} (\rho(x, t) - \sigma_i)_+^2 dx dt, \quad i = 1, \dots, N_Z, \quad (1.9)$$

donde (1.8) representa los costes por depuración de todas las plantas, y (1.9) representa los costes por multas en cada una de las  $N_Z$  zonas a proteger. En consecuencia, planteamos el siguiente problema de optimización multiobjetivo:

**PROBLEMA II :** Encontrar la función  $m(t) = (m_1(t), \dots, m_{N_E}(t))^T \in M$  que minimice  $K_C(m)$  dado por (1.8) y para todo  $i = 1, \dots, N_Z$ ,  $K_i(m)$  dado por (1.9), siendo  $\rho(x, t)$  la solución del sistema de estado (1.3).

En notación compacta puede escribirse como:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } K(m) \\ \text{sujeto a } m \in M, \end{cases} \quad (1.10)$$

donde la función de evaluación  $K : M \longrightarrow \mathbb{R}^{N_Z+1}$  viene dada por

$$K(m) = (K_C(m), K_1(m) \dots, K_{N_Z}(m))^T$$

## 1.5. Esquema de la tesis

En este trabajo se analizan las distintas estrategias que se presentan a la hora de enfrentarse a los problemas de gestión medioambiental en zonas costeras. Para abordar este análisis de forma más estructurada, el trabajo se ha dividido en cuatro partes principales:

1. Breve resumen del análisis matemático de los distintos sistemas que rigen el comportamiento de los fenómenos de polución en aguas poco profundas (capítulo 2).

En nuestro caso concreto, se presentan resultados de existencia, unicidad y regularidad de la ecuación que gobierna la dispersión de CF, y se obtiene la continuidad,

convexidad y diferenciabilidad (en el sentido de Gateaux) de los funcionales de coste que aparecen en los distintos problemas.

2. Estudio matemático del Problema I, relativo al caso en que cada una de las plantas posee un gestor diferente a las demás y, además, se le tiene asignado el cuidado de un determinado número de zonas a proteger (capítulos 3 y 4).

Se comenzará planteando el problema dentro de un contexto no cooperativo, obteniéndose resultados de existencia de equilibrios de Nash y de condiciones de optimalidad para su caracterización. También se presentará de manera detallada su resolución numérica, acompañada de resultados numéricos para casos realistas planteados en la ría de Vigo.

A continuación se estudiará el caso cooperativo, demostrando la existencia de óptimos Pareto y derivando condiciones de optimalidad para ellos. También se abordará la resolución numérica del problema, con resultados concretos para la ría de Vigo.

Por otra parte, es bien conocido que existen dos aproximaciones a la optimización, esto es, se puede “diferenciar y después discretizar”, o bien “discretizar y después diferenciar”. Cada uno de estos métodos tiene sus propias ventajas e inconvenientes. Una detallada discusión de estas dos aproximaciones en el contexto del control óptimo puede encontrarse en [44]. En relación a esta alternativa, se analizarán las diferencias y analogías aparecidas entre los dos procesos de resolución posibles: resolver primero el problema continuo original y a continuación - mediante métodos de discretización - obtener su solución numérica; o bien el proceso contrario: aproximar el problema original por un problema discreto finito-dimensional, y, a continuación, resolverlo. Se presentan resultados numéricos para avalar las conclusiones de esta comparación.

3. Estudio matemático del Problema II, relativo al caso en que sólo existe un gestor que maneja todas las plantas de depuración, teniendo la posibilidad de tratar por separado los aspectos ecológicos y los puramente económicos (capítulo 5).

En este caso se probará la existencia de soluciones de Pareto, se obtendrá un sistema de optimalidad para su caracterización y se abordará la resolución numérica del problema, con aplicaciones a un caso real en la ría de Vigo. Se introducirá además el concepto de *solución ecológicamente óptima* y se mostrará como esta puede ser aproximada a partir de óptimos-Pareto del problema.

4. Desarrollo de una toolbox de simulación numérica para la ayuda en la toma de decisiones de los problemas anteriores (capítulo 6).

Por último, antes de finalizar esta Introducción, debemos señalar que parte de los resultados que se han desarrollado en esta Tesis han sido publicados recientemente como artículos en varias revistas científicas con elevado factor de impacto [40, 5, 6], y han sido objeto de comunicaciones en varios congresos, tanto del ámbito nacional [39] como del internacional [3, 4].



## Capítulo 2

# Análisis matemático

Comenzaremos este capítulo recordando las siguientes definiciones clásicas de espacios de Sobolev: Dado un dominio  $D \subset \mathbb{R}^d$ , con  $d \geq 1$ , se define el espacio funcional  $L^p(D)$ , para  $1 \leq p \leq \infty$ , como el espacio de funciones Lebesgue-medibles (de hecho, clases de funciones) definido por:

$$L^p(D) = \{f : D \rightarrow \mathbb{R} : \int_D |f(y)|^p dy < \infty\}, \quad \text{si } 1 \leq p < \infty,$$
$$L^\infty(D) = \{f : D \rightarrow \mathbb{R} : \sup_{y \in D} |f(y)| < \infty\}.$$

Estos espacios están dotados de las normas correspondientes:

$$\|f\|_{L^p(D)} = \left[ \int_D |f(y)|^p dy \right]^{1/p}, \quad \text{para } 1 \leq p < \infty,$$
$$\|f\|_{L^\infty(D)} = \sup_{y \in D} |f(y)|.$$

También para  $1 \leq p \leq \infty$ , se definen los espacios de Sobolev  $W^{1,p}(D)$  como:

$$W^{1,p}(D) = \{f \in L^p(D) : \nabla f \in [L^p(D)]^d\},$$

dotados de la norma usual:

$$\|f\|_{W^{1,p}(D)} = \|f\|_{L^p(D)} + \|\nabla f\|_{[L^p(D)]^d}.$$

Como es habitual, en el caso en que  $p = 2$ , denotaremos:

$$H^1(D) = W^{1,2}(D).$$

Debemos recordar aquí que los espacios  $L^p(D)$  y  $W^{1,p}(D)$  son espacios de Banach para  $1 \leq p \leq \infty$ , y que, en el caso particular  $p = 2$ ,  $L^2(D)$  y  $H^1(D)$  son espacios de Hilbert.

Finalmente, consideremos un espacio de Banach  $V$  cualquiera y un intervalo  $[a, b] \subset \mathbb{R}$ . Entonces, para  $1 \leq q < \infty$ ,  $L^q(a, b; V)$  es el espacio de las funciones Lebesgue-medibles  $u : [a, b] \rightarrow V$  tales que:

$$\|u\|_{L^q(a,b;V)} = \left[ \int_a^b \|u(t)\|_V^q dt \right]^{1/q} < \infty,$$

mientras que  $L^\infty(a, b; V)$  es el espacio de las funciones Lebesgue-medibles  $u : [a, b] \rightarrow V$  tales que:

$$\|u\|_{L^\infty(a,b;V)} = \sup_{t \in [a,b]} \|u(t)\|_V < \infty.$$

Por último, recordemos que para todo  $1 \leq q \leq \infty$ ,  $L^q(a, b; V)$  es también un espacio de Banach.

## 2.1. Sistema de estado

La solución del sistema de estado (1.3):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho - \beta \Delta \rho + \kappa \rho &= \frac{1}{h} \sum_{j=1}^{N_E} m_j(t) \delta(x - P_j) && \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \frac{\partial \rho}{\partial n} &= 0 && \text{sobre } \partial \Omega \times (0, T), \\ \rho(x, 0) &= \rho_0(x) && \text{en } \Omega, \end{aligned} \right\}$$

puede definirse mediante técnicas de transposición (ver [22, 56, 60]) en el siguiente sentido:

**Definición 7** *Dados  $r, s \in [1, 2)$ ,  $\frac{2}{r} + \frac{2}{s} > 3$ , se dice que  $\rho \in L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega))$  es una solución del problema (1.3) si para cada  $\Phi \in C^1(\bar{\Omega} \times [0, T])$  tal que  $\Phi(\cdot, T) = 0$  se verifica:*

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega} \left( -\frac{\partial \Phi}{\partial t} \rho + \beta \nabla \Phi \nabla \rho + \vec{u} \Phi \nabla \rho + \kappa \Phi \rho \right) dx dt \\ = \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_j, t)} \Phi(P_j, t) m_j(t) dt + \int_{\Omega} \Phi(x, 0) \rho_0(x) dx \end{aligned} \quad (2.1)$$

Consideremos  $\mathcal{A}$  el operador diferencial definido por:

$$\mathcal{A}w = -\beta \Delta w + \vec{u} \cdot \nabla w + \kappa w, \quad (2.2)$$

sea  $\mathcal{A}^*$  su adjunto formal, esto es,

$$\mathcal{A}^*\Phi = -\beta\Delta\Phi - \operatorname{div}(\Phi \vec{u}) + \kappa\Phi, \quad (2.3)$$

y sea el operador derivada conormal asociado a  $\mathcal{A}^*$  dado por:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial n_{\mathcal{A}^*}} = \beta \frac{\partial\Phi}{\partial n} + \Phi \vec{u} \cdot \vec{n}. \quad (2.4)$$

Como es habitual, supondremos que el dominio acotado  $\Omega$  tiene frontera suficientemente regular, y que se verifica la siguiente condición estándar para evitar ángulos interiores nulos (ver, por ejemplo, [49]):

**(C1)** Existen dos constantes  $\alpha^* \in (0, 1)$  y  $r_0 > 0$  tales que para todo  $x_0 \in \partial\Omega$  y para todo  $r \in (0, r_0]$ , se cumple  $\operatorname{med}(B(x_0, r) \cap \Omega) \leq (1 - \alpha^*)\pi r^2$ .

Se tiene entonces el siguiente resultado:

**Teorema 1** *Existe una única función  $\rho = \rho(m) \in [L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega)) \cap L^2(0, T; L^2(\Omega))]$  con  $\frac{\partial\rho}{\partial t} \in L^r(0, T; (W^{1,s'}(\Omega))')$  tal que  $\rho$  es una solución de (1.3) y satisface*

$$\int_0^T \left\langle -\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \mathcal{A}^*\Phi, \rho \right\rangle dt = \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_j, t)} \Phi(P_j, t) m_j(t) dt + \int_{\Omega} \Phi(x, 0) \rho_0(x) dx, \quad (2.5)$$

para toda  $\Phi \in \mathcal{B} = \{\Phi \in L^2(0, T; H^2(\Omega)) \cap H^1(0, T; L^2(\Omega)) : \frac{\partial\Phi}{\partial n_{\mathcal{A}^*}} = 0 \text{ sobre } \partial\Omega \times (0, T), \Phi(\cdot, T) = 0\}$ .

Además se verifica:

1. *Existen constantes positivas  $C_1, C_2, C_3, C_4 > 0$ , que sólo dependen de los datos, y son tales que:*

$$\begin{aligned} \|\rho\|_{L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega))} &\leq C_1 \sum_{j=1}^{N_E} \|m_j\|_{L^\infty(0, T)} + C_2 \|\rho_0\|_{C(\bar{\Omega})}, \\ \|\rho\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))} &\leq C_3 \sum_{j=1}^{N_E} \|m_j\|_{L^\infty(0, T)} + C_4 \|\rho_0\|_{C(\bar{\Omega})}. \end{aligned}$$

2. *Si existe un conjunto cerrado  $E \subset \Omega$  tal que  $\Omega \setminus E$  es un dominio con suficiente regularidad en la frontera,  $\{P_1, P_2, \dots, P_{N_E}\} \subset E$ , y  $\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \subset (\Omega \setminus E)$ , entonces:*

a) La función  $\rho_{|\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T]} \in C(\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T])$  y existen constantes  $C_5, C_6 > 0$  tales que

$$\|\rho\|_{C(\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T])} \leq C_5 \sum_{i=1}^{N_E} \|m_i\|_{L^\infty(0, T)} + C_6 \|\rho_0\|_{C(\bar{\Omega})}.$$

b) Si la condición inicial es  $\rho_0 = 0$ , entonces  $\rho \in C^\alpha(\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T])$  para algún  $\alpha \in (0, 1)$ , y existe una constante  $C_7 > 0$  tal que

$$\|\rho\|_{C^\alpha(\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T])} \leq C_7 \sum_{i=1}^{N_E} \|m_i\|_{L^\infty(0, T)}.$$

c) La aplicación

$$\begin{aligned} F : (L^\infty(0, T))^{N_E} &\longrightarrow C(\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T]) \\ m &\longrightarrow F(m) = \rho_{|\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T]} \end{aligned}$$

está bien definida, y es afín y continua.

**Demostración** La demostración de la existencia y unicidad de solución, y del apartado 1 puede verse en el Teorema 3.2 de [60]. El apartado 2 a) se obtiene de los Lemas 3.3 y 3.4 de [60]. El apartado 2 b) se deduce del Teorema 10.1 del Capítulo III de [49]. Finalmente, el apartado 2 c) es una consecuencia directa del apartado 2 a).

## 2.2. Funciones objetivo

Del Teorema 1 se deduce que los funcionales objetivo  $J_j$ ,  $K_C$  y  $K_i$ , formalmente introducidos por (1.6), (1.8) y (1.9), están bien definidos en  $M = \prod_{j=1}^{N_E} M_j$ , y pueden ser expresados como:

$$J_j(m) = \Theta_j(m_j) + \sum_{i=n_{(j-1)}+1}^{n_j} H_i(F(m)), \quad (2.6)$$

$$K_C(m) = \sum_{j=1}^{N_E} \Theta_j(m_j), \quad (2.7)$$

$$K_i(m) = H_i(F(m)), \quad (2.8)$$

donde:

- $\Theta_j : M_j \longrightarrow \mathbb{R}$  definido por

$$\Theta_j(m_j) = \int_0^T f_j(m_j(t))dt, \quad (2.9)$$

- $H_i : C(\cup_{k=1}^{N_z} \bar{A}_k \times [0, T]) \longrightarrow \mathbb{R}$  definido por

$$H_i(\rho) = \frac{1}{2\epsilon_i} \int_{\bar{A}_i \times (0, T)} (\rho(x, t) - \sigma_i)_+^2 dx dt \quad (2.10)$$

Tenemos entonces los siguientes resultados de regularidad:

**Lema 1** Si  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \bar{m}_j])$  entonces  $\Theta_j$  es Gâteaux diferenciable en cualquier punto  $m_j \in M_j$  y en consecuencia

$$\langle \Theta'_j(m_j), \delta_j m_j \rangle = \int_0^T f'_j(m_j(t)) \delta_j m_j dt, \quad (2.11)$$

para todo  $\delta_j m_j \in L^\infty(0, T)$  tal que existe  $\epsilon_0 > 0$  para el cual  $m_j + \epsilon_0 \delta_j m_j \in M_j$ .

**Demostración** Sea  $m_j \in M_j$  y sea  $\delta_j m_j \in L^\infty(0, T)$  tal que existe  $\epsilon_0 > 0$  con  $m_j + \epsilon_0 \delta_j m_j \in M_j$ . Entonces  $\forall \lambda \in (0, \epsilon_0]$ ,  $m_j + \lambda \delta_j m_j \in M_j$  y

$$\frac{\Theta_j(m_j + \lambda \delta_j m_j) - \Theta_j(m_j)}{\lambda} = \int_0^T \frac{f_j(m_j(t) + \lambda(\delta_j m_j)(t)) - f_j(m_j(t))}{\lambda} dt. \quad (2.12)$$

Para c.t.p.  $t \in (0, T)$  se tiene

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{f_j(m_j(t) + \lambda(\delta_j m_j)(t)) - f_j(m_j(t))}{\lambda} = f'_j(m_j(t))(\delta_j m_j)(t), \quad (2.13)$$

y para  $\lambda \in (0, \epsilon_0]$

$$\begin{aligned} & \frac{f_j(m_j(t) + \lambda(\delta_j m_j)(t)) - f_j(m_j(t))}{\lambda} \\ &= f'_j(m_j(t) + \theta(t, \lambda)\lambda(\delta_j m_j)(t))(\delta_j m_j)(t) \text{ en c.t.p. } t \in (0, T), \end{aligned} \quad (2.14)$$

con  $\theta(t, \lambda) \in (0, 1)$ . Por tanto,

$$\begin{aligned} & \left| \frac{f_j(m_j(t) + \lambda(\delta_j m_j)(t)) - f_j(m_j(t))}{\lambda} \right| \leq C \\ &= \|\delta_j m_j\|_{L^\infty(0, T)} \max_{m_j \in [\underline{m}_j, \bar{m}_j]} |f'_j(m_j)| \text{ en c.t.p. } t \in (0, T). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Usando el Teorema de la convergencia dominada de Lebesgue se deduce que  $\Theta_j$  es Gâteaux-diferenciable en  $m_j$  y se obtiene la expresión (2.11).  $\square$

**Teorema 2** Si  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  es estrictamente convexo, entonces los funcionales objetivo  $J_j$ ,  $K_C$  y  $K_i$ , dados por (2.6), (2.7) y (2.8) respectivamente, son continuos, Gâteaux-diferenciables y convexos (estrictamente convexos en el caso de los dos primeros).

**Demostración** Si  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$ , del lema anterior se tiene que  $\Theta_j$  es Gâteaux-diferenciable. Si además  $f_j$  es estrictamente convexa,  $\Theta_j$  también lo es y, consecuentemente, el resultado es cierto para el funcional  $K_C$ , dado por (2.7).

Por otra parte, dado que la función

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{R} & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ x & \longrightarrow & (x - \sigma)_+^2 \end{array}$$

es convexa y diferenciable,  $H_i$  es convexo, continuo y Gâteaux-diferenciable. Finalmente, como la función  $F$  es afín y continua (ver Teorema 1) se tiene que el resultado es también válido para los funcionales  $J_j$  y  $K_i$ , dados por (2.6) y (2.8) respectivamente.  $\square$

## Capítulo 3

# Problema I

### 3.1. Estudio no cooperativo: Equilibrio de Nash

#### 3.1.1. Equilibrio de Nash en problemas de control multiobjetivo

Como ya mencionamos en la Introducción, el equilibrio de Nash proporciona una solución de un juego donde los jugadores interactúan bajo un esquema no cooperativo.

El equilibrio de Nash puede ser relacionado con los problemas de optimización multiobjetivo siempre y cuando el número de funcionales objetivo sea el mismo que la dimensión del vector de decisiones, lo que de hecho ocurre con el Problema I, dado por (1.7), que recordamos aquí para comodidad del lector:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } J(m) = (J_1(m), \dots, J_{N_E}(m))^T \\ \text{sujeto a } m \in M, \end{cases}$$

donde la función de evaluación  $J : M \rightarrow \mathbb{R}^{N_E}$  es una aplicación que lleva el vector de decisiones  $m = (m_1, \dots, m_{N_E})^T$  en el vector  $(J_1(m), \dots, J_{N_E}(m))^T$ .

Así, de acuerdo con el concepto de juego diferencial dado en la Introducción, podemos pensar que la función evaluación  $J(m)$  definida en el Problema I representa un juego donde, detrás de cada funcional objetivo  $J_j(m)$  existe un jugador (gestor) cuyo espacio de estrategias es  $M_j$  y cuyas ganancias están representadas por  $J_j(m)$ .

Por tanto planteamos la definición del equilibrio de Nash para el Problema I como:

**Definición 8** *Para el juego definido por el funcional de evaluación  $J$  del problema de optimización multiobjetivo dado por (1.7), un vector de decisión  $m^* = (m_1^*, \dots, m_{N_E}^*) \in M$*

es un equilibrio de Nash si satisface

$$J_j(m_1^*, \dots, m_{j-1}^*, m_j^*, m_{j+1}^*, \dots, m_{N_E}^*) \leq J_j(m_1^*, \dots, m_{j-1}^*, m_j, m_{j+1}^*, \dots, m_{N_E}^*) \quad \forall m_j \in M_j, \quad (3.1)$$

para todo  $j = 1, \dots, N_E$ .

### 3.1.2. Existencia de solución

Los resultados en la presente sección sólo requieren que  $f_j \in C([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$ , y que sea estrictamente convexa para todo  $j = 1, \dots, N_E$ .

Dados  $m = (m_1, \dots, m_{N_E}) \in M$ , y  $\rho_0 \in C(\overline{\Omega})$ , denotamos  $\varrho(m, \rho_0) = \rho$ , donde  $\rho$  es la solución débil (única) del sistema de estado (1.3), dada por el Teorema 1, correspondiente al segundo miembro  $\frac{1}{h} \left[ \sum_{j=1}^{N_E} m_j(t) \delta(x - P_j) \right]$  y a la condición inicial  $\rho_0$ . Debe tenerse en cuenta entonces que  $F(m) = \varrho(m, \rho_0)|_{\cup_{i=1}^{N_Z} \overline{A}_i \times [0, T]}$ .

Tenemos los siguientes lemas auxiliares:

**Lema 2** Si  $\{m^n\}$  es una sucesión de elementos de  $M$  tal que  $\{m^n\} \rightharpoonup m$  débilmente-<sup>\*</sup> en  $(L^\infty(0, T))^{N_E}$ , entonces:

$$\varrho(m^n, \rho_0) \rightharpoonup \varrho(m, \rho_0) \text{ en } L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega)) \text{ débil, } \quad \forall r, s \in [1, 2), \frac{2}{r} + \frac{2}{s} > 3, \quad (3.2)$$

$$\varrho(m^n, \rho_0) \rightharpoonup \varrho(m, \rho_0) \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \text{ débil,} \quad (3.3)$$

$$\varrho(m^n, \rho_0)|_{\cup_{i=1}^{N_Z} \overline{A}_i \times [0, T]} \rightarrow \varrho(m, \rho_0)|_{\cup_{i=1}^{N_Z} \overline{A}_i \times [0, T]} \text{ en } C(\cup_{i=1}^{N_Z} \overline{A}_i \times [0, T]). \quad (3.4)$$

**Demostración** Dado que  $\varrho(m, \rho_0) = \varrho(m, 0) + \varrho(0, \rho_0)$ , basta considerar el caso en que  $\rho_0 = 0$ . Como la sucesión  $\{m^n\}$  está acotada en  $(L^\infty(0, T))^{N_E}$ , deducimos del Teorema 1 que  $\varrho(m^n, 0)$  está acotada en  $L^2(0, T; L^2(\Omega))$  y en  $L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega))$  para cualesquiera  $r, s \in [1, 2)$  tales que  $\frac{2}{r} + \frac{2}{s} > 3$ . Fijemos  $r, s$  en tales condiciones. Existe una subsucesión, que seguimos denotando  $\{m^n\}$  y una función  $\bar{\rho} \in L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega)) \cap L^2(0, T; L^2(\Omega))$  tales que

$$\varrho(m^n, 0) \rightharpoonup \bar{\rho} \text{ en } L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega)) \text{ débil,} \quad (3.5)$$

$$\varrho(m^n, 0) \rightharpoonup \bar{\rho} \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \text{ débil.} \quad (3.6)$$

Pasando al límite en (2.1) y (2.5) deducimos que  $\bar{\rho} = \varrho(m, 0)$ . Debido a la unicidad del límite, concluimos que toda la sucesión  $\{\varrho(m^n, 0)\}$  (y no sólo una subsucesión) converge débilmente a  $\varrho(m, 0)$  en los espacios anteriores. Este argumento puede efectuarse para cualesquiera  $r, s \in [1, 2)$  tales que  $\frac{2}{r} + \frac{2}{s} > 3$ .

Por otra parte, por el teorema 1,  $\varrho(m^n, 0)|_{\bar{A}_i \times [0, T]}$  está acotada en  $C^\alpha(\bar{A}_i \times [0, T])$  y como la inyección de este espacio en  $C(\bar{A}_i \times [0, T])$  es compacta, existe una subsucesión, que seguimos denotando  $\{m^n\}$  tal que

$$\varrho(m^n, \rho_0)|_{\bar{A}_i \times [0, T]} \rightarrow \varrho(m, \rho_0)|_{\bar{A}_i \times [0, T]} \text{ en } C(\bar{A}_i \times [0, T]). \quad (3.7)$$

De nuevo, la unicidad del límite nos permite afirmar que esta convergencia tiene lugar para toda la sucesión y no sólo una subsucesión. Con esto queda demostrado el lema.  $\square$

**Nota 2** *Nótese que como  $M$  es un subconjunto acotado de  $(L^\infty(0, T))^{N_E}$ , coinciden sobre  $M$  la topología relativa de la topología  $(L^\infty(0, T))^{N_E}$  débil\* y la relativa de la topología  $(L^2(0, T))^{N_E}$  débil.*

Como el funcional

$$m_j \in M_j \longrightarrow J_j(m_1, \dots, m_{j-1}, m_j, m_{j+1}, \dots, m_{N_E}) \in \mathbb{R}$$

es estrictamente convexo y débilmente semicontinuo inferiormente, y dado que  $M_j$  es un subconjunto convexo, cerrado en  $L^2(0, T)$  y no vacío, un resultado clásico de la teoría de control óptimo [52] nos permite afirmar que, fijado  $(m_1, \dots, m_{j-1}, m_{j+1}, \dots, m_{N_E}) \in \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N_E} M_i$  existe un único  $m_j^* \in M_j$  tal que

$$J_j(m_1, \dots, m_{j-1}, m_j^*, m_{j+1}, \dots, m_{N_E}) \leq J_j(m_1, \dots, m_{j-1}, m_j, m_{j+1}, \dots, m_{N_E}) \quad \forall m_j \in M_j. \quad (3.8)$$

Definimos de este modo la aplicación

$$S_j : \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N_E} M_i \longrightarrow M_j,$$

donde  $S(m_1, \dots, m_{j-1}, m_{j+1}, \dots, m_{N_E}) = m_j^*$ .

**Lema 3** *La aplicación  $S_j$  es continua de  $\prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N_E} M_i$  dotado de la topología  $(L^\infty(0, T))^{N_E-1}$  débil\*, en  $M_j$  dotado de la topología  $L^\infty(0, T)$  débil\*.*

**Demostración** Para mayor comodidad de escritura, efectuaremos la demostración para el caso  $j = 1$ .

Sea  $\{(m_2^n, \dots, m_{N_E}^n)\}$  una sucesión de elementos de  $\prod_{i=2}^{N_E} M_i$ , sea  $(m_2, \dots, m_{N_E}) \in \prod_{i=2}^{N_E} M_i$  tal que  $\{(m_2^n, \dots, m_{N_E}^n)\} \rightharpoonup (m_2, \dots, m_{N_E})$  en  $(L^\infty(0, T))^{N_E-1}$  débil\*, y sea  $m_1^n = S_1(m_2^n, \dots, m_{N_E}^n)$ . Como  $\{m_1^n\}$  está acotada en  $L^\infty(0, T)$ , existe una subsucesión  $\{m_1^{n'}\}$  que converge en  $L^\infty(0, T)$  débil\* a un elemento  $m_1 \in M_1$  (ya que  $M_1$  es cerrado en esta topología). Basta probar que  $m_1 = S_1(m_2, \dots, m_{N_E})$ , pues entonces, por la unicidad del límite, se tendrá que la sucesión entera  $\{m_1^n\}$  converge a  $m_1$  en  $L^\infty(0, T)$  débil\*.

Debido a la definición de  $S_1$ , lo que tenemos que demostrar es que

$$J_1(m_1, m_2, \dots, m_{N_E}) \leq J_1(\hat{m}_1, m_2, \dots, m_{N_E}) \quad \forall \hat{m}_1 \in M_1. \quad (3.9)$$

Claramente  $\{(m_1^{n'}, m_2^{n'}, \dots, m_{N_E}^{n'})\} \rightharpoonup (m_1, m_2, \dots, m_{N_E})$  en  $(L^\infty(0, T))^{N_E}$  débil\*. Usando el Lema 2, la continuidad del funcional  $H_1$ , la semicontinuidad inferior débil del funcional  $\Theta_1$ , y la descomposición (2.6), deducimos que

$$\begin{aligned} J_1(m_1, m_2, \dots, m_{N_E}) &= \Theta_1(m_1) + H_1(\varrho(m_1, m_2, \dots, m_{N_E}, \rho_0)) \\ &\leq \liminf_{n' \rightarrow \infty} \Theta_1(m_1^{n'}) + \lim_{n' \rightarrow \infty} H_1(\varrho(m_1^{n'}, m_2^{n'}, \dots, m_{N_E}^{n'}, \rho_0)) \\ &= \liminf_{n' \rightarrow \infty} J_1(m_1^{n'}, m_2^{n'}, \dots, m_{N_E}^{n'}) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Como  $m_1^{n'} = S_1(m_2^{n'}, \dots, m_{N_E}^{n'})$ , en virtud de la definición de  $S_1$ , tenemos que

$$J_1(m_1^{n'}, m_2^{n'}, \dots, m_{N_E}^{n'}) \leq J_1(\hat{m}_1, m_2^{n'}, \dots, m_{N_E}^{n'}) \quad \forall \hat{m}_1 \in M_1. \quad (3.11)$$

Tomando el límite inferior, y usando de nuevo la descomposición (2.6), el Lema 2, y la continuidad de  $H_j$ , obtenemos que para todo  $\hat{m}_1 \in M_1$

$$\begin{aligned} \liminf_{n' \rightarrow \infty} J_1(m_1^{n'}, m_2^{n'}, \dots, m_{N_E}^{n'}) &\leq \liminf_{n' \rightarrow \infty} J_1(\hat{m}_1, m_2^{n'}, \dots, m_{N_E}^{n'}) \\ &= \Theta_1(\hat{m}_1) + \lim_{n' \rightarrow \infty} H_1(\varrho(\hat{m}_1, m_2^{n'}, \dots, m_{N_E}^{n'}, \rho_0)) \\ &= \Theta_1(\hat{m}_1) + H_1(\varrho(\hat{m}_1, m_2, \dots, m_{N_E}, \rho_0)) \\ &= J_1(\hat{m}_1, m_2, \dots, m_{N_E}), \end{aligned} \quad (3.12)$$

y por tanto se verifica (3.9). Con esto queda probado el lema.  $\square$

Utilizando los resultados técnicos previos, podemos demostrar entonces el siguiente resultado de existencia de equilibrio de Nash:

**Teorema 3** Si  $f_j \in C([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  es estrictamente convexa en  $[\underline{m}_j, \overline{m}_j]$  para todo  $j = 1, \dots, N_E$ , entonces el Problema I tiene un equilibrio de Nash.

**Demostración** Sea  $S : \prod_{j=1}^{N_E} M_j \longrightarrow \prod_{j=1}^{N_E} M_j$  la aplicación definida por

$$\begin{aligned} S(m_1, m_2, \dots, m_{N_E}) \\ = (S_1(m_2, m_3, \dots, m_{N_E}), S_2(m_1, m_3, \dots, m_{N_E}), \dots, S_{N_E}(m_1, m_2, \dots, m_{N_E-1})). \end{aligned}$$

Debido a la definición de las aplicaciones  $S_j$ , todo punto fijo de  $S$  es un equilibrio de Nash. Pero la existencia de un punto fijo de  $S$  está garantizada por el Teorema del punto fijo de Schauder [14], puesto que el conjunto  $\prod_{j=1}^{N_E} M_j$  es convexo y es compacto para la topología débil\* en  $(L^\infty(0, T))^{N_E}$  y, por otra parte, la aplicación  $S$  es continua para esta topología.  $\square$

### 3.1.3. Condiciones de optimalidad

Dado que  $M_j$  es convexo, y teniendo en cuenta el Teorema 2, una condición necesaria y suficiente para que se cumpla (3.1) es que:

$$\frac{\partial J_j}{\partial m_j}(m_1^*, \dots, m_{j-1}^*, m_j^*, m_{j+1}^*, \dots, m_{N_E}^*)(m_j - m_j^*) \geq 0 \quad \forall m_j \in M_j.$$

Nuestro objetivo pasa entonces por encontrar  $(m_1^*, \dots, m_{N_E}^*) \in \prod_{j=1}^{N_E} M_j$  que verifique el siguiente sistema de optimalidad:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial J_1}{\partial m_1}(m_1^*, \dots, m_{j-1}^*, m_j^*, m_{j+1}^*, \dots, m_{N_E}^*)(m_1 - m_1^*) &\geq 0 & \forall m_1 \in M_1, \\ \frac{\partial J_2}{\partial m_2}(m_1^*, \dots, m_{j-1}^*, m_j^*, m_{j+1}^*, \dots, m_{N_E}^*)(m_2 - m_2^*) &\geq 0 & \forall m_2 \in M_2, \\ &\vdots & \vdots \\ \frac{\partial J_{N_E}}{\partial m_{N_E}}(m_1^*, \dots, m_{j-1}^*, m_j^*, m_{j+1}^*, \dots, m_{N_E}^*)(m_{N_E} - m_{N_E}^*) &\geq 0 & \forall m_{N_E} \in M_{N_E}. \end{aligned} \right\} \quad (3.13)$$

Con la intención de simplificar este sistema, vamos a ver cómo puede calcularse  $\frac{\partial J_j}{\partial m_j}(m)$  para cualquier  $m = (m_1, m_2, \dots, m_{N_E}) \in \prod_{j=1}^{N_E} M_j$ . De modo similar a como se hace en [70], comenzaremos realizando los cálculos de modo formal, para ilustrar el proceso llevado a cabo.

Denotando por  $\delta_j m_j$  una pequeña perturbación de  $m_j$ , tenemos que

$$\begin{aligned} \delta_j J_j(m) &= \int_0^T \frac{\partial J_j}{\partial m_j}(m) \delta_j m_j dt \\ &= \int_0^T f'_j(m_j) \delta_j m_j dt + \sum_{l=n_{(j-1)}+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{\bar{A}_l \times (0, T)} (\rho(x, t) - \sigma_l)_+ \delta_j \rho dx dt, \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde la *sensibilidad*  $\delta_j \rho(x, t)$  es la solución del sistema

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \delta_j \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \delta_j \rho - \beta \Delta \delta_j \rho + \kappa \delta_j \rho &= \frac{1}{h} \delta_j m_j \delta(x - P_j) && \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \delta_j \rho(x, 0) &= 0 && \text{en } \Omega, \\ \frac{\partial \delta_j \rho}{\partial n} &= 0 && \text{sobre } \partial \Omega \times (0, T). \end{aligned} \right\} \quad (3.15)$$

Sea  $q_j(x, t)$  una función suficientemente regular en  $\bar{\Omega} \times [0, T]$ . Multiplicando la primera ecuación de (3.15) por  $q_j(x, t)$  e integrando en  $\Omega \times (0, T)$ , obtenemos

$$\begin{aligned} \int_{\Omega \times (0, T)} q_j \left[ \frac{\partial \delta_j \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \delta_j \rho - \beta \Delta \delta_j \rho + \kappa \delta_j \rho \right] dx dt \\ = \int_0^T \frac{1}{h(P_j, t)} q_j(P_j, t) (\delta_j m_j)(t) dt. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Aplicando Green e integración por partes a las integrales del primer miembro, y teniendo en cuenta las condiciones iniciales y de contorno en (3.15) resulta

$$\begin{aligned} \int_{\Omega \times (0, T)} \left( -\frac{\partial q_j}{\partial t} - \operatorname{div}(q_j \vec{u}) - \beta \Delta q_j + \kappa q_j \right) \delta_j \rho dx dt \\ + \int_{\Omega} q_j(x, T) \delta_j \rho(x, T) dx + \int_{\partial \Omega \times (0, T)} \left( \beta \frac{\partial q_j}{\partial n} + q_j \vec{u} \cdot \vec{n} \right) (\delta_j \rho) d\Gamma dt \\ = \int_0^T \frac{1}{h(P_j, t)} q_j(P_j, t) (\delta_j m_j)(t) dt. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Ahora, con el propósito de expresar  $\frac{\partial J_j}{\partial m_j}(m)$  de un modo más simple, consideramos como función  $q_j$  la solución, en el sentido de la Definición 9, del siguiente problema,

denominado *sistema de estado adjunto*:

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\partial q_j}{\partial t} - \beta \Delta q_j - \operatorname{div}(q_j \vec{u}) + \kappa q_j &= \sum_{l=n_{(j-1)}+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \chi_{\overline{A}_l} (\rho - \sigma_l)_+ && \text{en } \Omega \times (0, T), \\ q_j(x, T) &= 0 && \text{en } \Omega, \\ \beta \frac{\partial q_j}{\partial n} + q_j(\vec{u} \cdot \vec{n}) &= 0 && \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T), \end{aligned} \right\} \quad (3.18)$$

donde  $\chi_{\overline{A}_l}$  denota la función característica del conjunto  $\overline{A}_l$ .

**Definición 9** Decimos que  $q_j \in L^2(0, T; H^1(\Omega)) \cap C([0, T]; L^2(\Omega))$  es una solución del sistema adjunto (3.18) si  $q_j(x, T) = 0$  c.p.d. en  $\Omega$  y, además, se verifica que

$$\begin{aligned} & -\frac{d}{dt} \int_{\Omega} q_j(x, t) v(x) dx + \beta \int_{\Omega} \nabla q_j(x, t) \cdot \nabla v(x) dx + \int_{\Omega} q_j(x, t) \vec{u} \cdot \nabla v(x) dx + \\ & \int_{\Omega} \kappa q_j(x, t) v(x) dx = \sum_{l=n_{(j-1)}+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{\Omega} \chi_{\overline{A}_l}(x) (\rho(x, t) - \sigma_l)_+ v(x) dx, \quad \forall v \in H^1(\Omega) \end{aligned} \quad (3.19)$$

en el sentido de las distribuciones  $\mathcal{D}'(0, T)$ .

**Teorema 4** El sistema adjunto (3.18) tiene una única solución  $q_j \in L^2(0, T; H^2(\Omega)) \cap H^1(0, T; L^2(\Omega))$ .

**Demostración** Puede verse la Sección 9 del Capítulo IV de [49], en concreto, el Teorema 9.1 concerniente a la regularidad de soluciones para un problema con condiciones de contorno tipo Dirichlet, pero que sigue siendo válido también en nuestro caso - con una condición de contorno tipo Robin - tal y como se establece en el último párrafo de dicha Sección).  $\square$

Para la función  $q_j$ , solución del sistema (3.18), la ecuación (3.17) se reduce a

$$\sum_{l=n_{(j-1)}+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{\overline{A}_l \times (0, T)} (\rho(x, t) - \sigma_l)_+ \delta_j \rho dx dt = \int_0^T \frac{1}{h(P_j, t)} (\delta_j m_j)(t) q_j(P_j, t) dt. \quad (3.20)$$

Al sustituir (3.20) en la expresión de partida (3.14) obtenemos

$$\int_0^T \frac{\partial J_j}{\partial m_j}(m) \delta_j m_j dt = \int_0^T f'_j(m_j) \delta_j m_j dt + \int_0^T \frac{1}{h(P_j, t)} (\delta_j m_j)(t) q_j(P_j, t) dt$$

y, por consiguiente,

$$\frac{\partial J_j}{\partial m_j}(m) = f'_j(m_j) + \frac{1}{h(P_j, t)} q_j(P_j, t) \quad (3.21)$$

**Nota 3** *A pesar de que los cálculos precedentes se han hecho de modo formal, la regularidad dada por los Teoremas 1 y 4 para las funciones  $\delta_j \rho$  y  $q_j$ , soluciones respectivas de los problemas (3.15) y (3.18), es suficiente para probar que la expresión (3.21) es rigurosamente válida.*

La expresión (3.21), llevada al sistema (3.13), nos permite enunciar el siguiente resultado:

**Teorema 5 (Condiciones de un Equilibrio de Nash)** *Sea  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  es estrictamente convexa en  $[\underline{m}_j, \overline{m}_j]$  para todo  $j = 1, \dots, N_E$ . Entonces, el punto  $m^* = (m_1^*, \dots, m_{N_E}^*) \in M$  es un equilibrio de Nash del problema de optimización multiobjetivo (1.7) si y sólo si existen:*

1.  $\rho \in L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega)) \cap L^2(0, T; L^2(\Omega))$  para todo  $r, s \in [1, 2)$  con  $\frac{2}{r} + \frac{2}{s} > 3$ ,
2.  $q_1, q_2, \dots, q_{N_E} \in C([0, T]; L^2(\Omega)) \cap L^2([0, T]; H^1(\Omega))$ ,

tales que, para  $j = 1, 2, \dots, N_E$ , satisfacen:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho - \beta \Delta \rho + \kappa \rho = \sum_{k=1}^{N_E} \frac{1}{h} m_k^* \delta(x - P_k) \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \quad (3.22)$$

$$\rho(x, 0) = \rho_0(x) \quad \text{en } \Omega, \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial n} = 0 \quad \text{sobre } \partial \Omega \times (0, T). \quad (3.24)$$

$$-\frac{\partial q_j}{\partial t} - \beta \Delta q_j - \text{div}(q_j \vec{u}) + \kappa q_j = \sum_{l=n_{(j-1)+1}}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \chi_{\overline{A}_l} (\rho - \sigma_l)_+ \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \quad (3.25)$$

$$q_j(x, T) = 0 \quad \text{en } \Omega, \quad (3.26)$$

$$\beta \frac{\partial q_j}{\partial n} + q_j(\vec{u} \cdot \vec{n}) = 0 \quad \text{sobre } \partial \Omega \times (0, T). \quad (3.27)$$

$$\int_0^T [f'_j(m_j^*) + \frac{1}{h(P_j, t)} q_j(P_j, t)] (m_j - m_j^*) \geq 0, \quad \forall m_j \in M_j. \quad (3.28)$$

### 3.1.4. Resolución numérica

El objetivo de esta sección es proponer un algoritmo numérico para encontrar un equilibrio de Nash del Problema I. En principio, tal y como acabamos de ver, se trataría de encontrar un  $m^* \in M$  que satisfaga la condición de optimalidad

$$\langle \partial_j J_j(m^*), m_j - m_j^* \rangle \geq 0, \quad \forall m_j \in M_j,$$

para todo  $j = 1, \dots, N_E$ .

No obstante, si suponemos que el mínimo en (3.1) se alcanza en el interior de  $M_j$  (algo que en la práctica, debido a la forma particular de la función  $f_j$ , ocurre siempre que la penalización sobre la concentración de CF no sea trivial), la condición anterior puede substituirse por:

$$\partial_j J_j(m^*) = 0, \quad (3.29)$$

para todo  $j = 1, \dots, N_E$ .

Así pues, teniendo en cuenta que las derivadas parciales están dadas por (3.14), el  $m^* \in M$  buscado es la solución del siguiente sistema:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho - \beta \Delta \rho + \kappa \rho = \sum_{k=1}^{N_E} \frac{1}{h} m_k^* \delta(x - P_k) \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \quad (3.30)$$

$$\rho(x, 0) = \rho_0(x) \quad \text{en } \Omega, \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial n} = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T). \quad (3.32)$$

$$-\frac{\partial q_j}{\partial t} - \beta \Delta q_j - \text{div}(q_j \vec{u}) + \kappa q_j = \sum_{l=n(j-1)+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \chi_{\bar{A}_l} (\rho - \sigma_l)_+ \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \quad (3.33)$$

$$q_j(x, T) = 0 \quad \text{en } \Omega, \quad (3.34)$$

$$\beta \frac{\partial q_j}{\partial n} + q_j(\vec{u} \cdot \vec{n}) = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T). \quad (3.35)$$

$$f'_j(m_j^*) + \frac{1}{h(P_j, t)} q_j(P_j, t) = 0 \quad \text{en } (0, T), \quad (3.36)$$

para todo  $j = 1, 2, \dots, N_E$ .

Describimos a continuación el algoritmo utilizado para resolver este sistema.

### Discretización del sistema de optimalidad (3.30)-(3.36)

La resolución de ese sistema pasa por resolver previamente los sistemas de estado (3.30)-(3.32) y estado adjunto (3.33)-(3.35). Para ello utilizaremos un método que combina *características* para la discretización temporal con elementos finitos de Lagrange  $P_1$  para la discretización espacial. Este método es convergente para el sistema adjunto (ver [68]) y también para el sistema de estado (ver [9]).

Comenzamos haciendo una discretización en tiempo, tratando los términos convectivos en (3.30) y (3.33) con el método de las características [68]. Este método se basa en la igualdad:

$$\frac{Dy}{Dt}(x, t) = \frac{\partial y}{\partial t}(x, t) + \vec{u} \cdot \nabla y, \quad (3.37)$$

donde  $\frac{Dy}{Dt}$  denota la derivada material de  $y$  con respecto a  $\vec{u}$  y  $t$ , esto es,

$$\frac{Dy}{Dt}(x, t) = \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ y(X(x, t; \tau), \tau) \right] \Big|_{\tau=t}, \quad (3.38)$$

siendo  $\tau \rightarrow X(x, t; \tau)$  la trayectoria que sigue la partícula del fluido que en el instante  $t$  ocupa el lugar  $x$ . Esta función, llamada *característica*, puede obtenerse como la solución del siguiente problema de valor inicial

$$\left. \begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= \vec{u}(X(x, t; \tau), \tau), \\ X(x, t; t) &= x. \end{aligned} \right\} \quad (3.39)$$

Tomamos  $N \in \mathbb{N}$ ,  $\Delta t = \frac{T}{N}$ , y definimos  $t^n = n\Delta t$ . Denotamos por  $X^n(x) = X(x, t^{n+1}; t^n)$  la posición en el instante  $t^n$  de la partícula que en el instante  $t^{n+1}$  está en  $x$  y por  $Y^{n+1}(x) = X(x, t^n; t^{n+1})$  la posición en el instante  $t^{n+1}$  de la partícula que en el instante  $t^n$  estaba en  $x$ . Consideramos entonces las siguientes aproximaciones:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho = \frac{D\rho}{Dt} \simeq \frac{\rho^{n+1}(x) - \rho^n(X^n(x))}{\Delta t}, \quad (3.40)$$

$$-\frac{\partial q_j}{\partial t} - \vec{u} \cdot \nabla q_j = -\frac{Dq_j}{Dt} \simeq \frac{q_j^n(x) - q_j^{n+1}(Y^{n+1}(x))}{\Delta t}. \quad (3.41)$$

Esto nos lleva a aproximar el sistema (3.30)-(3.36) por el siguiente problema semidiscreto: Para  $j = 1, \dots, N_E$ , y para  $n = 0, 1, \dots, N - 1$ :

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^n \circ X^n}{\Delta t} - \beta \Delta \rho^{n+1} + \kappa \rho^{n+1} = \frac{1}{h^{n+1}} \sum_{k=1}^{N_E} m_k^{n+1} \delta(x - P_k) \quad \text{en } \Omega \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial \rho^{n+1}}{\partial n} = 0 \quad \text{en } \partial \Omega \quad (3.43)$$

$$\frac{q_j^n - q_j^{n+1} \circ Y^{n+1}}{\Delta t} - q_j^n \operatorname{div} \vec{u}^n - \beta \Delta q_j^n + \kappa q_j^n = \sum_{l=n_{(j-1)}+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \chi_{\bar{A}_l} (\rho^n - \sigma_l)_+ \quad \text{en } \Omega \quad (3.44)$$

$$\beta \frac{\partial q_j^n}{\partial n} + q_j^n (\vec{u}^n \cdot \vec{n}) = 0 \quad \text{en } \partial \Omega \quad (3.45)$$

$$f'_j(m_j^{n+1}) + \frac{1}{h^{n+1}(P_j)} q_j^{n+1}(P_j) = 0, \quad (3.46)$$

donde  $\rho^0 = \rho_0$ ,  $q_j^N = 0$ ,  $\vec{u}^n = \vec{u}(\cdot, t_n)$ ,  $h^n = \vec{h}(\cdot, t_n)$  y  $m_k^n = m_k(t_n)$ .

Consideramos ahora una aproximación poligonal  $\Omega_h$  de  $\Omega$ , y elegimos una triangulación admisible  $\tau_h$  de ésta, con triángulos de diámetro menor o igual que  $h$  y vértices  $\{x_j, j = 1, \dots, N_v\}$  de modo que los vértices de la frontera de  $\Omega_h$  pertenezcan también a la frontera de  $\Omega$ . Para cada  $n = 0, 1, \dots, N - 1$  consideramos las formulaciones variacionales de los problemas (3.42)-(3.43) y (3.44)-(3.45) y aproximamos los espacios en los que se busca la solución de esas formulaciones variacionales por el espacio de elementos finitos  $V_h = \{v_h \in C(\bar{\Omega}_h), v_h|_T \in P_1, T \in \tau_h\}$ .

**Nota 4** *Conviene destacar que, a pesar de que  $\rho$  podría no ser continua cerca de los puntos  $P_1, P_2, \dots, P_{N_E}$ , sabemos que  $\rho \in L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega))$ , con lo que parece razonable buscar la solución completamente discreta  $\rho_h^n$  en un espacio  $V_h$  que sea una aproximación interna de  $W^{1,s}(\Omega_h)$ . El hecho de que cualquier función polinómica a trozos en  $W^{1,s}(\Omega_h)$  sea continua nos lleva a esa elección de  $V_h$  (nótese que  $V_h = \{v_h \in W^{1,s}(\Omega_h), v_h \in P_1, T \in \tau_h\}$ ). Además, esa elección garantiza buenas propiedades de convergencia (cf. [9] y [68]).*

Sea  $\rho_h^0 \in V_h$  una aproximación de  $\rho^0$ . Definimos  $q_{jh}^N = 0, j = 1, \dots, N_E$ , y denotamos por  $X_h^n$  e  $Y_h^{n+1}$  las aproximaciones de  $X^n$  y  $Y^{n+1}$  obtenidas resolviendo el sistema (3.39) con el esquema de Euler regresivo. El sistema (3.42)-(3.43) se transforma entonces en

encontrar  $\rho_h^{n+1} \in V_h$  que verifique:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_h} \frac{\rho_h^{n+1} - \rho_h^n \circ X_h^n}{\Delta t} v_h + \beta \int_{\Omega_h} \nabla \rho_h^{n+1} \cdot \nabla v_h + \kappa \int_{\Omega_h} \rho_h^{n+1} v_h \\ = \sum_{k=1}^{N_E} \frac{m_k^{n+1}}{h^{n+1}(P_k)} v_h(P_k), \quad \forall v_h \in V_h. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Del mismo modo, (3.44)-(3.45) consiste ahora en encontrar  $q_{jh}^n \in V_h$  que satisfaga:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_h} \frac{q_{jh}^n - q_{jh}^{n+1} \circ Y_h^{n+1}}{\Delta t} v_h + \int_{\Omega_h} q_{jh}^n \bar{u}^n \cdot \nabla v_h + \int_{\Omega_h} \bar{u}^n \cdot (\nabla q_{jh}^n) v_h + \beta \int_{\Omega_h} \nabla q_{jh}^n \cdot \nabla v_h \\ + \kappa \int_{\Omega_h} q_{jh}^n v_h = \sum_{l=n(j-1)+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{\Omega_h} \chi_{\bar{A}_l} (\rho_h^n - \sigma_l)_+ v_h, \quad \forall v_h \in V_h. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Como es bien sabido, si consideramos  $\mathcal{B}_{V_h} = \{\tilde{v}_1, \tilde{v}_2, \dots, \tilde{v}_{N_v}\}$  la base nodal de  $V_h$ , es decir, aquella que para  $i, k = 1, 2, \dots, N_v$  cumple

$$\tilde{v}_i(x_k) = \begin{cases} 1, & \text{si } i = k, \\ 0, & \text{si } i \neq k, \end{cases}$$

las expresiones (3.47) y (3.48) pueden escribirse en forma matricial. De este modo, el sistema de optimalidad se convierte en el siguiente sistema, completamente discreto:

Dados  $\hat{\rho}_h^0 = (\rho_{h0}(x_1), \rho_{h0}(x_2), \dots, \rho_{h0}(x_{N_v}))^T$  y  $\hat{q}_{jh}^N = (0, 0, \dots, 0)^T$ , para  $j = 1, \dots, N_E$ ,  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , se buscan  $m_j^{n+1} \in \mathbb{R}$  (con  $\underline{m}_j < m_j^{n+1} < \bar{m}_j$ ),  $\hat{\rho}_h^{n+1} \in \mathbb{R}^{N_v}$ ,  $\hat{q}_{jh}^n \in \mathbb{R}^{N_v}$  verificando:

$$A_{1h} \hat{\rho}_h^{n+1} - B_{1h}^n \hat{\rho}_h^n = \sum_{k=1}^{N_E} \frac{m_k^{n+1}}{h^{n+1}(P_k)} b_{kh}, \quad (3.49)$$

$$A_{2h}^n \hat{q}_{jh}^n - B_{2h}^{n+1} \hat{q}_{jh}^{n+1} = \beta_{jh}^n, \quad (3.50)$$

$$f'_j(m_j^{n+1}) = -\frac{1}{h^{n+1}(P_j)} C_{jh} \hat{q}_{jh}^{n+1}, \quad (3.51)$$

donde, para  $i, k = 1, 2, \dots, N_v$ , se tiene:

- $\hat{\rho}_h^{n+1} = (\rho_h^{n+1}(x_1), \dots, \rho_h^{n+1}(x_{N_v}))^T$ ,  $\hat{q}_{jh}^{n+1} = (q_{jh}^{n+1}(x_1), \dots, q_{jh}^{n+1}(x_{N_v}))^T$
- $(A_{1h})_{ik} = \left(\frac{1}{\Delta t} + \kappa\right) \int_{\Omega_h} \tilde{v}_k \tilde{v}_i + \beta \int_{\Omega_h} \nabla \tilde{v}_k \cdot \nabla \tilde{v}_i$

- $(B_{1h}^n)_{ik} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_h} \tilde{v}_k(X_h^n(x)) \tilde{v}_i$
- $(A_{2h}^n)_{ik} = \left( \frac{1}{\Delta t} + \kappa \right) \int_{\Omega_h} \tilde{v}_k \tilde{v}_i + \beta \int_{\Omega_h} \nabla \tilde{v}_k \cdot \nabla \tilde{v}_i + \int_{\Omega_h} \tilde{v}_k (\vec{u}^n \cdot \nabla \tilde{v}_i) + \int_{\Omega_h} (\vec{u}^n \cdot \nabla \tilde{v}_k) \tilde{v}_i$
- $(B_{2h}^{n+1})_{ik} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_h} \tilde{v}_k(Y_h^{n+1}(x)) \tilde{v}_i$
- $(b_{jh})_i = \tilde{v}_i(P_j)$
- $(\beta_{jh}^n)_i = \sum_{l=n(j-1)+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{\Omega_h} \chi_{\bar{A}_l} \left( \sum_{m=1}^{N_v} [(\hat{\rho}_h^n)_m \tilde{v}_m - \sigma_l]_+ \right) \tilde{v}_i$
- $C_{jh}$  es la matriz de orden  $1 \times N_v$  que extrae el valor de  $q_{jh}^{n+1}(P_j)$  del vector  $\hat{q}_{jh}^{n+1}$ .

Todas las integrales previas son calculadas mediante fórmulas de cuadratura. En particular, para obtener  $B_{1h}^n$  y  $B_{2h}^{n+1}$ , calculamos previamente los valores de  $X_h^n$  y  $Y_h^{n+1}$  en los puntos de la cuadratura. En general, estos no son puntos de la malla pero los valores  $\tilde{v}_j$  sobre ellos pueden ser fácilmente calculados.

Debemos destacar por último que el sistema (3.49)-(3.51) es equivalente a la discretización del sistema de optimalidad (3.30)-(3.36), pero no es el sistema de optimalidad del problema discreto. En efecto, con la discretización previa nosotros podríamos escribir el problema discreto y, a continuación, derivar el sistema de optimalidad correspondiente. Esta alternativa es también válida (con sus ventajas y desventajas) y será estudiada en el Capítulo 4.

### Resolución del sistema discreto (3.49)-(3.51)

Atendiendo a que  $\beta_{jh}^n$  es función (no lineal) de  $\hat{\rho}_h^n$ , inicialmente el sistema discreto (3.49)-(3.51) resulta ser completamente acoplado, no lineal, cuadrado y de dimensión  $3NN_v + N_E N$ . No obstante, debemos tener presente que nuestro objetivo es encontrar una aproximación de  $m^* \in M$ , equilibrio de Nash del Problema I.

La discretización temporal que acabamos de introducir nos lleva a aproximar  $M$  por el espacio discreto  $M^{\Delta t} = \prod_{j=1}^{N_E} M_j^{\Delta t}$ , donde

$$M_j^{\Delta t} = \{m_j^{\Delta t} \in M_j \text{ tal que } m_j^{\Delta t}|_{(t^{n-1}, t^n]} \in P_0, n = 1, \dots, N\}. \quad (3.52)$$

Cada  $m_j^{\Delta t} \in M_j^{\Delta t}$  está unívocamente determinado por un vector  $\tilde{m}_j = (m_j^1, m_j^2, \dots, m_j^N)^T \in [\underline{m}_j, \overline{m}_j]^N$  definido por:

$$m_j^{\Delta t}|_{(t^{n-1}, t^n]}(t) = m_j^n, \quad n = 1, \dots, N,$$

lo que nos conduce a definir el conjunto admisible  $\tilde{M}_j = [\underline{m}_j, \overline{m}_j]^N$  y  $\tilde{M} = \prod_{j=1}^{N_E} \tilde{M}_j$ .

Nuestro objetivo es pues calcular un vector  $\tilde{m} = (\tilde{m}_1, \dots, \tilde{m}_{N_E})^T \in \mathbb{R}^{N_{NE}}$ , con  $\tilde{m}_j = (m_j^1, \dots, m_j^N)^T$ , que verifique

$$\underline{m}_j < m_j^n < \overline{m}_j, \quad j = 1, \dots, N_E, \quad n = 1, \dots, N, \quad (3.53)$$

y que proporcione una buena aproximación de los valores del equilibrio de Nash en los puntos de la malla temporal.

Con este propósito, podemos pensar el sistema (3.49)-(3.51) como un sistema de la forma

$$S(\tilde{m}) = 0, \quad (3.54)$$

para  $S : \mathbb{R}^{N_{NE}} \rightarrow \mathbb{R}^{N_{NE}}$ , y resolverlo, teniendo en cuenta las restricciones de cota (3.53), con un método de mínimos cuadrados estándar, utilizando diferencias finitas para calcular la matriz jacobiana.

Para cada  $\tilde{m} \in \mathbb{R}^{N_{NE}}$ , el cálculo de  $S(\tilde{m})$  se hace a través del siguiente algoritmo:

### Algoritmo 1: Evaluación de la función S

Datos iniciales:  $\rho_h^0 \in V_h$ ,  $\tilde{m} \in \tilde{M}$

- *Paso 1:* (Resolución del sistema de estado) Tomando  $\tilde{m}$  dado, resolver (3.49) para  $n = 0, 1, \dots, N - 1$ .
- *Paso 2:* (Resolución del sistema adjunto) Para  $j = 1, \dots, N_E$ , calcular  $\beta_{jh}^n$  a partir de la solución obtenida en el Paso 1 y resolver (3.50) para  $n = N - 1, \dots, 0$ .
- *Paso 3:* (Evaluación de  $S(\tilde{m})$ ) A partir del valor de  $\tilde{m}$  y de la solución obtenida en el Paso 2, construir

$$S(\tilde{m}) = \left[ \left[ f'_j(m_j^{n+1}) + \frac{1}{h^{n+1}(P_j)} C_{jh} \hat{q}_{jh}^{n+1} \right]_{n=0}^{N-1} \right]_{j=1}^{N_E} \quad (3.55)$$

**Nota 5** Si, para resolver el sistema  $S(\tilde{m}) = 0$ , recurriésemos a métodos numéricos que empleasen la segunda derivada de  $S$ , deberíamos usar una regularización de la función  $\frac{1}{2}(\rho - \sigma_j)_+^2$  que fuese, al menos, dos veces diferenciable. En ese caso, fijaríamos un

parámetro  $\delta > 0$  pequeño y tomaríamos como posible regularización  $C^2$  de  $\frac{1}{2}y_+^2$  la función:

$$\psi(y) = \begin{cases} 0 & \text{si } y \leq 0, \\ \frac{y^3}{6\delta} & \text{si } 0 \leq y \leq \delta, \\ \frac{1}{2}(y^2 - \delta y + \frac{\delta^2}{3}) & \text{si } \delta \leq y. \end{cases} \quad (3.56)$$

Nótese que  $\psi$  es una función creciente y convexa de  $y$  tal que  $\psi(y) > 0$  si y sólo si  $y > 0$ , es decir, en nuestro contexto, sólo cuando hay un exceso de concentración del indicador.

### 3.1.5. Resolución numérica alternativa: Aplicación directa de las sensibilidades

Una alternativa para encontrar un equilibrio de Nash del Problema I es utilizar la caracterización que proporciona el sistema de optimalidad expresado directamente a partir de las sensibilidades.

Como ya hemos dicho, si el mínimo en (3.1) se alcanza en el interior de  $M_j$ , el equilibrio de Nash del Problema I viene dado como la solución del sistema (3.29). Utilizando (3.14), el problema se reduce a encontrar  $m^* = (m_1^*, \dots, m_{N_E}^*) \in M$  que verifique:

$$\left. \begin{aligned} \int_0^T f'_1(m_1^*) \delta_1 m_1 dt + \sum_{l=1}^{n_1} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{A_l \times [0, T]} (\rho - \sigma_l)_+ \delta_1 \rho dx dt &= 0, & \forall \delta_1 m_1 \in L^\infty(0, T), \\ \int_0^T f'_2(m_2^*) \delta_2 m_2 dt + \sum_{l=n_1+1}^{n_2} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{A_l \times [0, T]} (\rho - \sigma_l)_+ \delta_2 \rho dx dt &= 0, & \forall \delta_2 m_2 \in L^\infty(0, T), \\ & \vdots & \\ \int_0^T f'_{N_E}(m_{N_E}^*) \delta_{N_E} m_{N_E} dt + \sum_{l=n(N_E-1)+1}^{n_{N_E}} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{A_l \times [0, T]} (\rho - \sigma_l)_+ \delta_{N_E} \rho dx dt &= 0, & \forall \delta_{N_E} m_{N_E} \in L^\infty(0, T), \end{aligned} \right\} \quad (3.57)$$

donde  $\rho$  es la solución del sistema de estado (3.22)-(3.24), y para  $j = 1, \dots, N_E$ , la sensibilidad  $\delta_j \rho$  es la solución del sistema linealizado (3.15).

Destacamos ahora como característica fundamental de nuestro problema que, tal y

como se afirma en el Teorema 1, la aplicación

$$\begin{aligned} F : (L^\infty(0, T))^{N_E} &\longrightarrow C(\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T]) \\ m &\longrightarrow F(m) = \rho_{|\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T]} \end{aligned}$$

es afín y que, por tanto, las sensibilidades  $\delta_j \rho$  no dependen de  $m^*$ . Además, las ecuaciones del sistema (3.57) son lineales respecto a  $\delta_j m_j$  y, por consiguiente, es suficiente con que las igualdades se cumplan para los elementos de una base del espacio.

Observamos entonces que si aproximamos  $L^\infty(0, T)$  por un espacio de dimensión  $N$ , una vez fijada una base de ese espacio, podemos calcular de modo previo a todo el proceso las sensibilidades correspondientes a los elementos de esa base, lo que nos proporciona una manera directa de evaluar la función  $F$  (sin necesidad de resolver cada vez el sistema de estado). Además, como veremos a continuación, la exigencia de que se cumplan (3.57) para los elementos de la base fijada permite transformar el sistema en un sistema no lineal, cuadrado, de dimensión  $NN_E$ , y completamente desacoplado de la resolución de los problemas parabólicos.

### Aproximación discreta de las sensibilidades

Consideremos pues la aproximación de  $L^\infty(0, T)$  dada por

$$L^{\Delta t} = \{f^{\Delta t} \in L^\infty(0, T) \text{ tal que } f^{\Delta t}|_{(t^{n-1}, t^n]} \in P_0, n = 1, 2, \dots, N\},$$

y sea  $C^{\Delta t} = \{e_1^{\Delta t}, \dots, e_N^{\Delta t}\}$  la base de ese espacio inducida por la base conónica de  $\mathbb{R}^N$ .

Para cada  $j = 1, \dots, N_E$ ,  $l = 1, \dots, N$ , la sensibilidad  $\delta_j^l \rho$  correspondiente al elemento  $e_l^{\Delta t} \in C^{\Delta t}$  es la solución del sistema:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \delta_j^l \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \delta_j^l \rho - \beta \Delta \delta_j^l \rho + \kappa \delta_j^l \rho &= \frac{1}{h} e_l^{\Delta t} \delta(x - P_j) && \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \delta_j^l \rho(x, 0) &= 0 && \text{en } \Omega, \\ \frac{\partial \delta_j^l \rho}{\partial n} &= 0 && \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T). \end{aligned} \right\} \quad (3.58)$$

Procediendo como en la resolución del sistema de estado (ver sección anterior) podemos obtener una aproximación discreta de la sensibilidad  $\delta_j^l \rho$ . Concretamente, la aproximación

viene dada por  $\{(\delta_j^l \hat{\rho})_h^n\}_{n=0}^N$  solución del siguiente sistema linealizado discreto:

$$\left. \begin{aligned} &(\delta_j^l \hat{\rho})_h^0 = (0, \dots, 0)^T, \\ &\text{y para cada } n = 0, \dots, N-1 : \\ &A_{1h}(\delta_j^l \hat{\rho})_h^{n+1} - B_{1h}^n(\delta_j^l \hat{\rho})_h^n = \frac{\delta_{l,n+1}}{h^l(P_j)} b_{jh}, \end{aligned} \right\} \quad (3.59)$$

donde

$$\delta_{l,n+1} = \begin{cases} 1 & \text{si } l = n+1, \\ 0 & \text{si } l \neq n+1. \end{cases} \quad (3.60)$$

### Cálculo de la aproximación discreta del estado a partir de la aproximación discreta de las sensibilidades

Como ya hemos apuntado anteriormente, el conocimiento para  $j = 1, \dots, N_E$ ,  $l = 1, \dots, N$ , de las aproximaciones  $\{(\delta_j^l \hat{\rho})_h^n\}_{n=0}^N$  proporciona directamente la aproximación discreta del estado dada por (3.49). Para ver esto es suficiente observar que como (3.49) es un problema lineal, la función

$$\begin{aligned} G : \mathbb{R}^{NN_E} &\longrightarrow \mathbb{R}^{N_v(N+1)} \\ \tilde{m} &\longrightarrow G(\tilde{m}) = (\hat{\rho}_h^0, \dots, \hat{\rho}_h^N)^T \end{aligned}$$

es afín, y la matriz  $(DG)_{N_v(N+1) \times NN_E}$  viene dada, precisamente, por:

$$DG = \left( \begin{array}{c|c|c} \frac{(\delta_1^1 \hat{\rho})_h^0}{\dots} & \dots & \frac{(\delta_1^N \hat{\rho})_h^0}{\dots} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{(\delta_1^1 \hat{\rho})_h^N}{\dots} & \dots & \frac{(\delta_1^N \hat{\rho})_h^N}{\dots} \end{array} \middle| \dots \middle| \begin{array}{c|c|c} \frac{(\delta_{N_E}^1 \hat{\rho})_h^0}{\dots} & \dots & \frac{(\delta_{N_E}^N \hat{\rho})_h^0}{\dots} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{(\delta_{N_E}^1 \hat{\rho})_h^N}{\dots} & \dots & \frac{(\delta_{N_E}^N \hat{\rho})_h^N}{\dots} \end{array} \right)$$

De este modo, una vez calculadas y almacenadas la matriz  $DG$  y el vector  $G(0)$  (para lo que sólo hay que resolver una vez el sistema (3.49) con  $m_k^{n+1} = 0$  para  $k = 1, \dots, N_E$ , y  $n = 0, \dots, N-1$ ) se tiene que, para cada  $\tilde{m} \in \mathbb{R}^{NN_E}$

$$(\hat{\rho}_h^0, \dots, \hat{\rho}_h^N)^T = G(\tilde{m}) = DG \cdot \tilde{m} + G(0)$$

### Discretización del sistema de optimalidad (3.57)

Para mallas con un número de vértices elevado, la matriz  $DG$  puede alcanzar un tamaño poco manejable. Sin embargo, pensando en resolver el sistema (3.57), observamos que sólo interesan los valores de las sensibilidades y del estado en las zonas a proteger, con lo que

el tamaño de la matriz a almacenar puede reducirse sensiblemente, si suponemos que las zonas a proteger son disjuntas entre sí y que están formadas por la unión de elementos de la malla  $\tau_h$ . En ese caso, para cada zona  $\bar{A}_l$  tenemos una triangulación  $\tau_h^l \subset \tau_h$  dada por  $\tau_h^l = \{T \in \tau_h \text{ tal que } T \subset \bar{A}_l\}$ . Denotamos por  $N_{v_l}$  el número de vértices de  $\tau_h^l$  y para  $l = 1, \dots, N_Z$ ,  $j = 1, \dots, N_E$ , extraemos de  $DG$  las matrices  $DG_{lj}$  de orden  $N_{v_l}(N+1) \times N$ , definidas al eliminar en  $DG$  las primeras  $(j-1)N$  y las posteriores  $(N_E-j)N$  columnas, así como todas las filas que *no están relacionadas* con vértices de la zona  $\bar{A}_l$ . Concretamente, si  $\{y_k^l\}_{k=1}^{N_{v_l}}$  son los vértices de la zona  $\bar{A}_l$ , se definen

$$DG_{lj} = \left( \begin{array}{c|c} \begin{array}{c} (\delta_j^1 \rho)_h^0(y_1^l) \\ \vdots \\ (\delta_j^1 \rho)_h^0(y_{N_{v_l}}^l) \\ \hline \vdots \\ (\delta_j^1 \rho)_h^N(y_1^l) \\ \vdots \\ (\delta_j^1 \rho)_h^N(y_{N_{v_l}}^l) \end{array} & \begin{array}{c} (\delta_j^N \rho)_h^0(y_1^l) \\ \vdots \\ (\delta_j^N \rho)_h^0(y_{N_{v_l}}^l) \\ \hline \vdots \\ (\delta_j^N \rho)_h^N(y_1^l) \\ \vdots \\ (\delta_j^N \rho)_h^N(y_{N_{v_l}}^l) \end{array} \end{array} \right)$$

Obviamente, si para cada  $l = 1, \dots, N_z$  definimos las funciones

$$\begin{aligned} G_l : \mathbb{R}^{NN_E} &\longrightarrow \mathbb{R}^{N_{v_l}(N+1)} \\ \tilde{m} &\longrightarrow G_l(\tilde{m}) = \left( \rho_h^0(y_1^l), \dots, \rho_h^0(y_{N_{v_l}}^l), \dots, \rho_h^N(y_1^l), \dots, \rho_h^N(y_{N_{v_l}}^l) \right)^T \end{aligned}$$

se verifica que  $DG_l = (DG_{l1}|DG_{l2}|\dots|DG_{lN_E})$  y, para cada  $\tilde{m} \in \mathbb{R}^{NN_E}$

$$G_l(\tilde{m}) = DG_l \cdot \tilde{m} + G_l(0),$$

donde  $G_l(0) \in \mathbb{R}^{N_{v_l}(N+1)}$  se obtiene al extraer de  $G(0)$  las componentes correspondientes a los vértices de  $\bar{A}_l$ .

Veamos ahora como discretizar el sistema de optimalidad (3.57). Aproximamos  $L^\infty(0, T)$  por  $L^{\Delta t}$  y consideramos como base de ese espacio  $C^{\Delta t}$ . El sistema (3.57) se aproxima por:

Encontrar  $m^{\Delta t} \in M^{\Delta t}$  que verifique

$$\int_0^T f'_j(m_j^{\Delta t}) e_i^{\Delta t} dt + \sum_{l=n_{(j-1)+1}}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{\bar{A}_l \times [0, T]} (\rho - \sigma_l)_+ \delta_j^i \rho \, dx dt = 0, \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, N, \\ j = 1, \dots, N_E. \end{array} \quad (3.61)$$

En esta expresión vamos a utilizar las aproximaciones de  $\rho|_{\bar{A}_l \times [0, T]}$  y  $\delta_j^i \rho|_{\bar{A}_l \times [0, T]}$  que nos proporcionan, respectivamente, la función  $G_l$  (conocida directamente a partir de  $DG_l$

y  $G_l(0)$ ) y la columna  $i$  de la matriz  $DG_{lj}$ . En cuanto a las integrales, utilizaremos una aproximación  $P_0$  en tiempo y la fórmula de los vértices para la integral en espacio. Concretamente, aproximaremos:

$$\begin{aligned} \int_0^T f(t) dt &\approx \Delta t \sum_{n=1}^N f(t^n) \\ \int_{\bar{A}_l} f(x) dx &= \sum_{T \in \tau_h^l} \int_T f(x) dx \approx \sum_{T \in \tau_h^l} \frac{1}{3} \text{Area}(T) (f(v_{T,1}) + f(v_{T,2}) + f(v_{T,3})) \\ &= \sum_{k=1}^{N_{v_l}} \frac{1}{3} U_k^l f(y_k^l), \end{aligned}$$

donde  $U_k^l$  es la suma de las áreas de los triángulos de la zona  $\bar{A}_l$  a los que pertenece el vértice  $y_k^l$ .

Con estas aproximaciones, (3.61) se transforma en:

$$\Delta t \left( f_j'(m_j^i) + \sum_{l=n_{(j-1)+1}}^{n_j} \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^{N_{v_l}} \frac{1}{3\epsilon_l} U_k^l (\rho_h^n(y_k^l) - \sigma_l)_+ (\delta_j^i \rho)_h^n(y_k^l) \right) = 0, \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, N, \\ j = 1, \dots, N_E. \end{array}$$

Finalmente, si para cada  $l = 1, \dots, N_Z$ , introducimos la función

$$\begin{aligned} H_l : \mathbb{R}^{N_{v_l}(N+1)} &\longrightarrow \mathbb{R}^{N_{v_l}(N+1)} \\ \tilde{x} = \left( (x_k^n)_{k=1}^{N_{v_l}} \right)_{n=0}^N &\longrightarrow H_l(\tilde{x}) = \left( \left( \frac{1}{3\epsilon_l} U_k^l (x_k^n - \sigma_l)_+ \right)_{k=1}^{N_{v_l}} \right)_{n=0}^N \end{aligned} \quad (3.62)$$

la discretización del sistema de optimalidad (3.57) resulta:

Encontrar  $\tilde{m} = (\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E})^T \in \mathbb{R}^{N N_E}$ , con  $\tilde{m}_j = (m_j^1, \dots, m_j^N)^T$ , que verifique  $\underline{m}_j < m_j^n < \bar{m}_j$  para  $n = 1, \dots, N$ ,  $j = 1, \dots, N_E$ , y sea tal que

$$\begin{pmatrix} f_j'(m_j^1) \\ \vdots \\ f_j'(m_j^N) \end{pmatrix} + \sum_{l=n_{(j-1)+1}}^{n_j} (DG_{lj})^T \cdot H_l(G_l(\tilde{m})) = 0, \quad \text{para todo } j = 1, \dots, N_E. \quad (3.63)$$

### Resolución del sistema discreto (3.63)

El sistema (3.63) es un sistema no lineal, cuadrado y de dimensión  $NN_E$ , y en su resolución puede emplearse, igual que se hizo para resolver el sistema (3.54), un método de mínimos cuadrados estándar o un método con derivadas segundas, si bien en este caso habría que tener en cuenta la Nota 5.

Conviene destacar que la resolución de este sistema presenta, como principal inconveniente, que de modo previo hay que calcular y almacenar las matrices  $DG_{lj}$  para  $l = 1, \dots, N_Z$ , y  $j = 1, \dots, N_E$ , (lo que supone resolver (3.59)  $NN_E$  veces) y los vectores  $G_l(0)$  para  $l = 1, \dots, N_Z$ , (lo que supone resolver una vez el sistema (3.49)). A su favor, debe indicarse que, una vez almacenados las matrices  $DG_{lj}$ , los vectores  $G_l(0)$ , y los valores de  $U_k^l$  para  $k = 1, \dots, N_{v_l}$ , y  $l = 1, \dots, N_Z$ , la evaluación de la función que define el sistema (3.63) es directa y no depende de ningún otro dato de la malla, lo que hace que la resolución del sistema sea, no sólo rápida, sino muy fácil de realizar con cualquier tipo de software comercial.

## 3.2. Estudio cooperativo: Soluciones de Pareto

En la presente sección recordaremos la definición formal de las soluciones óptimo-Pareto para un problema general de optimización multiobjetivo, además de varios conceptos relacionados, y mostraremos como caracterizar dichas soluciones extendiendo a espacios de Banach el método de pesos clásico, introducido para espacios de dimensión finita, por ejemplo, en Gass-Saaty [41] y Zadeh [81].

### 3.2.1. Soluciones de Pareto en espacios de Banach: El método de pesos

Sea  $X$  un espacio de Banach, sea  $S \subset X$  cerrado, y sean  $g_k : X \rightarrow \mathbb{R}$  para  $k = 1, \dots, n$ . Consideremos el siguiente problema de optimización multiobjetivo de la forma

$$\begin{cases} \text{Minimizar } \{g_1(x), \dots, g_n(x)\} \\ \text{sujeto a } x \in S. \end{cases} \quad (3.64)$$

Debido a la contradicción y la posible incompatibilidad de los funcionales objetivo  $g_k$ , en general no es posible encontrar una solución que sea óptima de forma simultánea para todos los objetivos. Lo anterior da sentido y definen la dificultad de los problemas de optimización multiobjetivo. El espacio de los objetivos no está ordenado de forma natural (porque, en realidad, es parcialmente ordenado), pero, sin embargo, es posible extraer para su análisis algunos de los vectores objetivo. Tales vectores serán aquellos donde ninguna

de sus componentes puede ser mejorada sin el deterioro de al menos otra de ellas. Estos vectores son usualmente llamados soluciones óptimo-Pareto del problema (3.64).

Una definición más formal viene dada a continuación (ver Miettinen [62]):

**Definición 10**  $x^* \in S$  es una solución óptimo-Pareto del problema (3.64) si no existe algún otro  $x \in S$  tal que:

1.  $g_k(x) \leq g_k(x^*)$  para todo  $k = 1, \dots, n$ .
2. Para al menos un  $k \in \{1, \dots, n\}$ ,  $g_k(x) < g_k(x^*)$ .

Recordemos que, si  $x^* \in S$  es una solución óptimo-Pareto, el vector objetivo  $g(x^*) \in \mathbb{R}^n$  es también llamado óptimo-Pareto. Usualmente, existen muchas (infinitud) soluciones óptimo-Pareto. El conjunto de soluciones óptimo-Pareto es llamado *conjunto de óptimos-Pareto*, y el conjunto de vectores objetivo que son óptimo-Pareto es llamado *frente Pareto*.

Con la intención de caracterizar el conjunto de óptimos-Pareto, por cada vector  $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^n$  tal que  $\lambda_k \geq 0$  para todo  $k = 1, \dots, n$ , y  $\sum_{k=1}^n \lambda_k = 1$ , introducimos el siguiente problema llamado *problema de pesos*:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } g(x) = \sum_{k=1}^n \lambda_k g_k(x) \\ \text{sujeto a } x \in S. \end{cases} \quad (3.65)$$

Comenzaremos el estudio enunciando algunas definiciones clásicas (ver Clarke [26]):

**Definición 11** Sea  $g : X \rightarrow \mathbb{R}$  Lipschitz cerca de un punto dado  $x \in X$ , y sea  $\nu$  cualquier otro vector en  $X$ . La derivada direccional generalizada de  $g$  en  $x$  en la dirección  $\nu$ , denotada por  $g^0(x; \nu)$ , es definida como

$$g^0(x; \nu) = \limsup_{y \rightarrow x, t \downarrow 0} \frac{g(y + t\nu) - g(y)}{t}, \quad (3.66)$$

donde  $y \in X$  y  $t \in \mathbb{R}$ .

El gradiente generalizado de  $g$  en  $x$ , denotado por  $\partial g(x)$ , es el subconjunto de  $X^*$  dado por:

$$\partial g(x) = \{\xi \in X^* : g^0(x; \nu) \geq \langle \xi, \nu \rangle \quad \forall \nu \in X\}.$$

**Definición 12** Sea  $S$  un subconjunto no vacío de  $X$ . La función de distancia  $d_S : X \rightarrow \mathbb{R}$  esta definida por

$$d_S(x) = \inf\{\|x - s\| : s \in S\}.$$

Si  $x$  es un punto en  $S$ , un vector  $\nu$  en  $X$  es tangente a  $S$  en  $x$  siempre que  $d_S^0(x; \nu) = 0$ . El conjunto de todos los vectores tangentes a  $S$  en  $x$  se denota por  $T_S(x)$ , y el cono normal a  $S$  es definido por:

$$N_S(x) = \{\xi \in X^* : \langle \xi, \nu \rangle \leq 0, \forall \nu \in T_S(x)\}.$$

Si  $S$  es un conjunto convexo el cono normal coincide con el cono de normales en el sentido del análisis convexo (Clarke, [26] Proposición 2.4.4)

$$N_S(x) = \{\xi \in X^* : \langle \xi, y - x \rangle \leq 0, \forall y \in S\}.$$

Presentaremos ahora algunos resultados relacionando las soluciones óptimo-Pareto del problema (3.64) con las soluciones del problema de pesos (3.65):

**Teorema 6** Para un vector dado  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^n$ ,  $\lambda \geq 0$ , la solución del problema de pesos (3.65) es una solución óptimo-Pareto del problema (3.64) si se satisface una de las dos condiciones siguientes:

1.  $\lambda_k > 0$ , para todo  $k = 1, 2, \dots, n$ .
2. La solución del problema (3.65) es única.

**Demostración** La técnica usada en el caso discreto (ver el capítulo 3.1 de Miettinen [62]) es válida sin ningún cambio en cualquier espacio de Banach: Sea  $x^* \in S$  una solución del problema (3.65). Supongamos que está no es una solución óptimo-Pareto del problema (3.64). En este caso existe  $\hat{x} \in S$ , tal que,  $g_k(\hat{x}) \leq g_k(x^*)$  para todo  $k = 1, 2, \dots, n$ , y  $g_j(\hat{x}) < g_j(x^*)$  para al menos un  $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ .

Si  $\lambda_k > 0$  para todo  $k = 1, 2, \dots, n$ , entonces obtenemos  $\sum_{k=1}^n \lambda_k g_k(\hat{x}) < \sum_{k=1}^n \lambda_k g_k(x^*)$ , lo que contradice que  $x^*$  sea solución del problema (3.65).

Si sólo tenemos que  $\lambda_k \geq 0$  para todo  $k = 1, 2, \dots, n$ , entonces únicamente podemos obtener  $\sum_{k=1}^n \lambda_k g_k(\hat{x}) \leq \sum_{k=1}^n \lambda_k g_k(x^*)$ , pero en este caso, si  $x^*$  es la única solución de (3.65), tendremos  $\sum_{k=1}^n \lambda_k g_k(x^*) < \sum_{k=1}^n \lambda_k g_k(x)$  para todo  $x \in S$ , lo que contradice la desigualdad anterior. Por tanto, en ambos casos,  $x^*$  es una solución óptimo-Pareto del problema (3.64).  $\square$

**Lema 4** Sea  $g_k$  Lipschitz cerca de cualquier punto dado de  $S$  para todo  $k = 1, \dots, n$ . Sea  $x^*$  una solución óptimo-Pareto del problema (3.64). Entonces, existe  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^n$ ,  $\lambda \geq 0$ , y  $\lambda_k > 0$  para al menos un  $k \in \{1, 2, \dots, n\}$ , tal que

$$0 \in \sum_{k=1}^n \lambda_k \partial g_k(x^*) + N_S(x^*)$$

**Demostración** Ver Teorema 6.13 y Nota 6.1.2-(iv) de Clarke [26]. □

**Teorema 7** Sea  $S$  convexo y  $g_k$  acotado, convexo y Gâteaux diferenciable sobre  $S$ . Si  $x^*$  es una solución óptimo-Pareto del problema (3.64), entonces existe  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^n$ ,  $\lambda \geq 0$  y  $\lambda_k > 0$  para al menos un  $k \in \{1, 2, \dots, n\}$ , tal que  $x^*$  es la solución del problema de pesos (3.65).

**Demostración** Por el Lema 4 existe  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^n$ ,  $\lambda \geq 0$ , y  $\lambda_k > 0$  para al menos un  $k \in \{1, 2, \dots, n\}$ , tal que

$$-\nabla g(x^*) \in N_S(x^*),$$

ya que, bajo las hipótesis del Teorema, de la Proposición 2.3.6 de Clarke [26] se tiene que  $\partial g(x^*) = \{\nabla g(x^*)\}$ . Además, ya que  $S$  es convexo tenemos:

$$\langle \nabla g(x^*), x - x^* \rangle \geq 0, \quad \forall x \in S. \quad (3.67)$$

Como  $g$  es una función convexa y Gâteaux diferenciable, (3.67) es equivalente al hecho de que  $x^*$  es una solución al problema de pesos (3.65) (ver, por ejemplo, Capítulo IV de Cea [23]). □

**Nota 6** El vector  $\lambda \in \mathbb{R}^n$  en el problema (3.65) es un término multiplicador. Si  $m^*$  es una solución del problema (3.65) para un multiplicador  $\lambda$ , entonces también lo será para cualquier multiplicador  $\alpha\lambda$  ( $\alpha \in \mathbb{R}$ ,  $\alpha > 0$ ). Por tanto, el Teorema 7 podría también estipularse para  $\lambda$  tal que  $\sum_{k=1}^n \lambda_k = 1$ .

### 3.2.2. Existencia de solución

**Teorema 8** Si  $f_j \in C([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  es estrictamente convexa para todo  $j = 1, \dots, N_E$ , entonces para cada vector  $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_{N_E}) \in \mathbb{R}^{N_E}$ ,  $\lambda \geq 0$  y  $\lambda_j > 0$  para al menos un  $j \in \{1, \dots, N_E\}$ , existe una solución óptimo-Pareto para el problema (1.7).

**Demostración** A la vista del Teorema 6, es suficiente demostrar que el problema

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Minimizar } J_P(m) = \sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j J_j(m) \\ \text{sujeto a } m \in M \end{array} \right. \quad (3.68)$$

tiene solución única.

Con la intención de probar esto, consideramos  $\{m^n\} \in M$  una sucesión minimizante. Dado que esta sucesión es acotada, podemos deducir la existencia de una subsucesión (que denotaremos igual) la cual converge débil\* en  $(L^\infty(0, T))^{N_E}$  a un elemento  $m \in M$ . Por el Lema 2 tenemos que

$$\rho(m^n, \rho_0) \rightharpoonup \rho(m, \rho_0) \text{ en } L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega)) \text{ débil } \forall r, s \in [1, 2), \frac{2}{r} + \frac{2}{s} > 3, \quad (3.69)$$

$$\rho(m^n, \rho_0) \rightharpoonup \rho(m, \rho_0) \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \text{ débil}, \quad (3.70)$$

$$\rho(m^n, \rho_0)_{|\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T]} \rightarrow \rho(m, \rho_0)_{|\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T]} \text{ en } C(\cup_{i=1}^{N_Z} \bar{A}_i \times [0, T]). \quad (3.71)$$

Por la unicidad del límite, las convergencias anteriores son válidas para la sucesión entera. Finalmente, dado que  $J_P$  es débilmente semicontinua inferiormente (debido a la continuidad y convexidad de  $J_P$ , la cual es una combinación convexa de  $J_j$ ), tenemos que:

$$J_P(m) \leq \liminf J_P(m^n)$$

de donde deducimos que  $m$  es la solución del problema de optimización multiobjetivo.

Finalmente, la unicidad de la solución es obtenida directamente de la convexidad estricta de  $J_P$ , dado que  $\lambda_j > 0$  para al menos un  $j \in \{1, \dots, N_E\}$ .  $\square$

### 3.2.3. Condiciones de optimalidad

Dedicamos la presente sección a ver como las soluciones óptimo-Pareto del Problema I pueden caracterizarse a partir de las soluciones del problema adjunto (3.18).

**Teorema 9** Si  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \bar{m}_j])$  es estrictamente convexa, entonces para todo  $j = 1, 2, \dots, N_E$ , el funcional  $J_j$  dado por (2.6) es Gâteaux diferenciable en cada punto  $m = (m_1, \dots, m_{N_E}) \in M$  y, además,

$$\langle DJ_j(m), \delta m \rangle = \int_0^T f'_j(m_j) \delta_j m_j dt + \sum_{k=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_k, t)} q_j(P_k, t) \delta_k m_k dt \quad (3.72)$$

para todo  $\delta m = (\delta_1 m_1, \dots, \delta_{N_E} m_{N_E}) \in (L^\infty(0, T))^{N_E}$  satisfaciendo  $m + \epsilon \delta m \in M$  para algún  $\epsilon > 0$ .

**Demostración** La diferenciabilidad Gâteaux de  $J_j$  ya fue puesta de manifiesto en el Teorema 2. Comprobemos ahora la expresión (3.72).

En primer lugar, dado que el operador diferencial es lineal podemos escribir

$$\langle DJ_j(m), \delta m \rangle = \langle \Theta'_j(m_j), \delta_j m_j \rangle + \sum_{i=n_{(j-1)}+1}^{n_j} \langle D(H_i \circ F)(m), \delta m \rangle. \quad (3.73)$$

Del Lema 1 tenemos

$$\langle \Theta'_j(m_j), \delta_j m_j \rangle = \int_0^T f'_j(m_j) \delta_j m_j dt. \quad (3.74)$$

Por otra parte, dado que  $F$  es afín y continuo, derivando en la expresión de  $H_i$  se tiene

$$\langle D(H_i \circ F)(m), \delta m \rangle = \frac{1}{\epsilon_i} \int_{\bar{A}_i \times (0, T)} (\rho - \sigma_i)_+ \delta \rho dx dt, \quad (3.75)$$

donde  $\delta \rho$  es la solución del sistema

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \delta \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \delta \rho - \beta \Delta \delta \rho + \kappa \delta \rho &= \sum_{k=1}^{N_E} \frac{1}{h} \delta_k m_k \delta(x - P_k) && \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \delta \rho(x, 0) &= 0 && \text{en } \Omega, \\ \frac{\partial \delta \rho}{\partial n} &= 0 && \text{sobre } \partial \Omega \times (0, T). \end{aligned} \right\} \quad (3.76)$$

La expresión (3.75) puede simplificarse utilizando el estado adjunto  $q_j$ , de modo totalmente similar a como se hizo para obtener el Teorema 5: Multiplicamos la primera ecuación de (3.76) por la solución  $q_j$  de (3.18) e, integrando sobre  $\Omega \times (0, T)$ , obtenemos

$$\int_{\Omega \times (0, T)} q_j \left[ \frac{\partial \delta \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \delta \rho - \beta \Delta \delta \rho + \kappa \delta \rho \right] dx dt = \sum_{k=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_k, t)} q_j(P_k, t) \delta_k m_k dt. \quad (3.77)$$

Tomando en consideración las condiciones inicial y de frontera del sistema (3.76), usando la formula de Green, e integrando por partes resulta

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega \times (0, T)} \left( -\frac{\partial q_j}{\partial t} - \operatorname{div}(q_j \vec{u}) - \beta \Delta q_j + \kappa q_j \right) \delta \rho dx dt \\ & + \int_{\Omega} q_j(x, T) \delta \rho(x, T) dx + \int_{\partial \Omega \times (0, T)} \left( \beta \frac{\partial q_j}{\partial n} + q_j \vec{u} \cdot \vec{n} \right) \delta \rho d\Gamma dt \\ & = \sum_{k=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_k, t)} q_j(P_k, t) \delta_k m_k dt, \end{aligned} \quad (3.78)$$

y, finalmente, teniendo en cuenta que  $q_j(x, t)$  es la solución de (3.18), se obtiene que

$$\sum_{l=n_{(j-1)}+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{\bar{A}_l \times (0, T)} (\rho - \sigma_l)_+ \delta \rho dx dt = \sum_{k=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_k, t)} q_j(P_k, t) \delta_k m_k dt. \quad (3.79)$$

Finalmente, la expresión (3.72) se obtiene llevando a (3.73) la expresión (3.74) y la combinación de (3.75) y (3.79).  $\square$

Ahora, estamos en condiciones de establecer la siguiente caracterización de las soluciones óptimo-Pareto del problema (1.7):

**Teorema 10 (Condiciones de una solución óptimo-Pareto)** *Supongamos que,  $f_j \in C^1[\underline{m}_j, \bar{m}_j]$  es estrictamente convexa. Entonces el punto  $m^* = (m_1^*, m_2^*, \dots, m_{N_E}^*) \in M$  es una solución óptimo-Pareto del problema (1.7) si y sólo si existen:*

1.  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N_E}) \in \mathbb{R}^{N_E}$ ,  $\lambda \geq 0$ ,  $\sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j = 1$ ,
2.  $\rho \in L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega)) \cap L^2(0, T; L^2(\Omega))$  para todo  $r, s \in [1, 2)$  con  $\frac{2}{r} + \frac{2}{s} > 3$ ,
3.  $q_1, q_2, \dots, q_{N_E} \in C([0, T]; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega))$ ,

tales que  $\rho$  satisface el sistema de estado (3.22)-(3.24),  $q_j$  satisface el sistema de estado adjunto (3.25)-(3.27) para todo  $j = 1, 2, \dots, N_E$ , y se verifica la siguiente condición de optimalidad:

$$\sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j \left\{ \int_0^T [f'_j(m_j^*)(m_j - m_j^*) dt + \sum_{k=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_k, t)} q_j(P_k, t) (m_k - m_k^*) dt \right\} \geq 0, \quad \forall m \in M. \quad (3.80)$$

**Demostración** Si  $m^* \in M$  es una solución óptimo-Pareto del problema (1.7), entonces existen (ver Teorema 7)  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N_E}) \in \mathbb{R}^{N_E}$ ,  $\lambda \geq 0$ ,  $\sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j = 1$ , tales que  $m^*$  es una solución del problema (3.68). Por tanto, ya que  $M$  es convexa y  $J_P$  es Gâteaux diferenciable (ver Teorema 9), tendremos (ver, por ejemplo, el Capítulo IV de Cea [23]):

$$\langle DJ_P(m^*), (m - m^*) \rangle = \sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j \langle DJ_j(m^*), m - m^* \rangle \geq 0, \quad \forall m \in M. \quad (3.81)$$

Así, por el uso de la expresión (3.72), y en base a los Teoremas 1 y 4, obtenemos la existencia de las funciones  $\rho$  y  $q_1, \dots, q_{N_E}$  que verifican (3.22)-(3.24), (3.25)-(3.27) y (3.80).

De manera inversa, de la existencia de un multiplicador  $\lambda \in \mathbb{R}^{N_E}$ ,  $\lambda \geq 0$ ,  $\sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j = 1$  y las funciones  $\rho$  y  $q_1, \dots, q_{N_E}$  verificando (3.22)-(3.24), (3.25)-(3.27) y (3.80), obtenemos (3.81) y, en consecuencia,  $m^* \in M$  es una solución del problema (3.68). Finalmente, ya que la solución del problema (3.68) es única (ver Teorema 8), del Teorema 6 concluimos que  $m^*$  es una solución óptimo-Pareto del problema (1.7).  $\square$

### 3.2.4. Resolución numérica

El principal objetivo de esta sección consiste en proponer un algoritmo numérico para obtener el conjunto óptimo-Pareto del Problema I que, en acuerdo a lo mencionado en secciones previas, es posible escribir como:

$$\mathcal{P}^* = \bigcup_{\substack{\lambda \in \mathbb{R}^{N_E} \\ \lambda \geq 0 \\ \sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j = 1}} \{m^* \in M : m^* \text{ es la única solución del problema (3.68)}\} \quad (3.82)$$

Desde un punto de vista computacional, la identificación del conjunto de óptimos-Pareto  $\mathcal{P}^*$  puede dividirse en dos fases:

**Fase 1:** Generar un número suficiente ( $imax$ ) de vectores de pesos  $\{\lambda^1, \dots, \lambda^{imax}\} \subset \mathbb{R}^{N_E}$  verificando  $\lambda^i \geq 0$ ,  $\sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j^i = 1$ , para  $i = 1, \dots, imax$ , que permitan determinar de modo aproximado la forma del frente Pareto del problema. Es bien conocido (ver, por ejemplo, la Sección 3.1.2 de Miettinen [62] y las referencias contenidas en esta) que, dependiendo de las características del problema, esta fase puede ser muy laboriosa. En este trabajo, usamos el siguiente algoritmo, que genera una familia de vectores de pesos uniformemente distribuida en  $[0, 1]^{N_E}$ , y ya utilizada, por ejemplo, en Caballero *et al.* [21]:

#### Algoritmo 2: Generación de vectores de pesos uniformemente distribuidos en $[0, 1]^{N_E}$

Fijamos  $N_p \in \mathbb{N}$ , número de divisiones que tomamos del intervalo  $[0, 1]$ . Definimos  $paso = 1/N_p$  y, para cada  $i = 1, \dots, imax$ , generamos  $\lambda^i = (\lambda_1^i, \dots, \lambda_{N_E}^i)^T \in \mathbb{R}^{N_E}$  a través de los siguientes  $N_E - 1$  bucles anidados:

```

i = 0
do k1 = 0 to Np
  do k2 = 0 to Np - k1
    ⋮
    do kNE-1 = 0 to Np - (k1 + ... + kNE-2)
      i = i + 1
      do j = 1 to NE - 1
        λji = kj * paso
      end do
      λNEi = 1 - (λ1i + ... + λNE-1i)
    end do
  end do
end do

```

**Fase 2:** Para cada  $i = 1, \dots, imax$ , tenemos que resolver el problema (3.68) tomando  $\lambda = \lambda^i$ . Para hacer esto, nuevamente elegimos un entero  $N \in \mathbb{N}$ , calculamos el incremento en tiempo  $\Delta t = \frac{T}{N}$ , y definimos los pasos en tiempo  $t^n = n\Delta t$  para  $n = 0, 1, \dots, N$ . Considerando lo realizado anteriormente, aproximamos el conjunto admisible  $M$  por el espacio de dimensión finita  $M^{\Delta t} = \prod_{j=1}^{N_E} M^{\Delta t}$  donde  $M^{\Delta t}$  fue definido en (3.52).

Por tanto, es posible aproximar el problema de pesos (3.68) por el siguiente problema discreto:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Minimizar } J_P(m^{\Delta t}) = \sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j J_j(m^{\Delta t}) \\ \text{sujeto a } m^{\Delta t} \in M^{\Delta t} \end{array} \right. \quad (3.83)$$

Para resolver el problema anterior, puede utilizarse cualquier método de optimización diferenciable convexa. En este trabajo, implementamos un algoritmo de gradiente espectral proyectado (SPG, según sus siglas en inglés), analizado por Birgin *et al.* [19].

En este algoritmo, la estrategia de la longitud de paso no monótona es combinada con el gradiente espectral elegido, con el objetivo de acelerar el proceso de convergencia. Si por cada  $f^{\Delta t} \in L^{\Delta t}$ , denotamos  $P(f^{\Delta t})$  como la proyección ortogonal sobre  $M^{\Delta t}$  (la cual

puede ser calculada de una forma simple e inmediata), el algoritmo para resolver (3.83) puede ser esquematizado de la siguiente forma:

**Algoritmo 3: Algoritmo SPG**

Datos iniciales: Un entero  $R \geq 1$ , un parámetro pequeño  $\alpha_{min} > 0$ , un parámetro grande  $\alpha_{max} > \alpha_{min}$ , un parámetro de decrecimiento suficiente  $\gamma \in (0, 1)$ , dos parámetros de salvaguarda  $0 < \nu_1 < \nu_2 < 1$ , y un pequeño parámetro de tolerancia  $\epsilon > 0$ . Además,  $m_{initial}^{\Delta t} \in M^{\Delta t}$ , y  $\alpha_{initial} \in [\alpha_{min}, \alpha_{max}]$ .

- *Paso 0 (Inicialización):*

Hacer  $iter \leftarrow 0$ ,  $m_{iter}^{\Delta t} \leftarrow m_{initial}^{\Delta t}$ ,  $\alpha \leftarrow \alpha_{initial}$ .

- *Paso 1 (Test de parada):*

Si  $\|P(m_{iter}^{\Delta t} - \nabla J_P(m_{iter}^{\Delta t})) - m_{iter}^{\Delta t}\| < \epsilon$ , entonces detener y tomar  $m_{iter}^{\Delta t}$  como solución del problema (3.83).

- *Paso 2 (Actualización de datos):*

- *Paso 2.1:* Calcular  $d_{iter}^{\Delta t} = P(m_{iter}^{\Delta t} - \alpha \nabla J_P(m_{iter}^{\Delta t})) - m_{iter}^{\Delta t}$ . Hacer  $\lambda \leftarrow 1$ .

- *Paso 2.2:* Hacer  $m_+^{\Delta t} = m_{iter}^{\Delta t} + \lambda d_{iter}^{\Delta t}$ .

- *Paso 2.3:* Si  $J_P(m_+^{\Delta t}) \leq \max_{0 \leq k \leq \min\{iter, R-1\}} J_P(m_{iter-k}^{\Delta t}) + \gamma \lambda \langle d_{iter}^{\Delta t}, \nabla J_P(m_{iter}^{\Delta t}) \rangle$ , entonces definir  $m_{iter+1}^{\Delta t} = m_+^{\Delta t}$  e ir a *Paso 3*. En otro caso, definir  $\lambda_{new} \in [\nu_1 \lambda, \nu_2 \lambda]$ , hacer  $\lambda \leftarrow \lambda_{new}$  e ir a *Paso 2.2*.

- *Paso 3 (Nueva longitud del paso):*

Calcular  $b = \langle m_{iter+1}^{\Delta t} - m_{iter}^{\Delta t}, \nabla J_P(m_{iter+1}^{\Delta t}) - \nabla J_P(m_{iter}^{\Delta t}) \rangle$ . Si  $b \leq 0$ , hacer  $\alpha \leftarrow \alpha_{max}$ . En otro caso, calcular  $a = \langle m_{iter+1}^{\Delta t} - m_{iter}^{\Delta t}, m_{iter+1}^{\Delta t} - m_{iter}^{\Delta t} \rangle$  y hacer  $\alpha \leftarrow \min\{\alpha_{max}, \max\{\alpha_{min}, a/b\}\}$ .

- *Paso 4 (Puesta al día):* Hacer  $iter \leftarrow (iter + 1)$  e ir a *Paso 1*.

La única dificultad del algoritmo SPG está relacionada con el cálculo de  $J_P(m^{\Delta t})$  y  $\nabla J_P(m^{\Delta t})$ , cuyos detalles se dan a continuación.

**Cálculo de  $J_P(m^{\Delta t})$ : Resolución del sistema de estado (1.3)**

Para un  $m^{\Delta t} \in M^{\Delta t}$  dado, el cálculo de  $J_P(m^{\Delta t})$  pasa por resolver el problema de estado (1.3) y obtener una aproximación de  $\rho(m^{\Delta t}, \rho_0)$ .

Tal y como se ha descrito en la sección 3.1.4, dado  $\rho_h^0(x) \in V_h$  aproximación de  $\rho_0(x)$ , determinada unívocamente por el vector  $\hat{\rho}_h^0 = (\rho_{h0}(x_1), \dots, \rho_{h0}(x_{N_v}))^T$ , para cada  $n =$

$0, 1, \dots, N-1$  la función  $\rho(m^{\Delta t}, \rho_h^0)(\cdot, t^{n+1})$  se aproxima por  $\rho_h^n \in V_h$ , determinada únicamente por el vector  $\hat{\rho}_h^{n+1} \in \mathbb{R}^{N_v}$  solución de (3.49).

Una vez obtenida la aproximación  $\rho(m^{\Delta t}, \rho_h^0)(\cdot, t^{n+1})$  para  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , la evaluación de  $J_P(m^{\Delta t})$  se hace utilizando una aproximación  $P_0$  para las integrales temporales y la fórmula de los vértices para las integrales en espacio (ver Sección 3.1.5).

Esquemáticamente tenemos:

**Algoritmo 4: Evaluación de la función  $J_P$**

Datos iniciales:  $\rho_h^0 \in V_h$ ,  $m^{\Delta t} \in M^{\Delta t}$ .

- *Paso 1:* Para  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , resolver el sistema discreto (3.49).
- *Paso 2:* Calcular

$$J_P(m^{\Delta t}) = \sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j \Delta t \sum_{n=1}^N \left( f_j(m_j^n) + \sum_{l=n_{(j-1)+1}}^{n_j} \frac{1}{6\epsilon_l} \sum_{k=1}^{N_{v_l}} U_k^l(\rho_h^n(y_k^l) - \sigma_l)_+^2 \right)$$

**Cálculo de  $\nabla J_P(m^{\Delta t})$ : Resolución de los problemas adjuntos (3.18)**

Al igual que ocurría en la resolución numérica de la Sección 3.1 (búsqueda de un equilibrio de Nash) el cálculo de  $\nabla J_P(m^{\Delta t})$  puede hacerse utilizando los estados adjuntos o las sensibilidades. Esquematzamos aquí, como ejemplo, el algoritmo que utiliza los estados adjuntos.

**Algoritmo 5: Calculo de  $\nabla J_P(m^{\Delta t})$**

Datos iniciales:  $m^{\Delta t} \in M^{\Delta t}$  y para  $n = 0, 1, \dots, N$ ,  $\rho_h^n \in V_h$ , aproximación de  $\rho(m^{\Delta t}, \rho_{h0})(\cdot, t^n)$ .

- *Paso 1:* Para  $j = 1, \dots, N_E$ , tomar  $q_{jh}^N = 0 \in V_h$  y resolver el sistema discreto (3.48) para  $n = N-1, \dots, 0$ .
- *Paso 2:* Para  $n = 1, \dots, N$ , y para  $j = 1, \dots, N_E$ , calcular

$$\partial_{j_n} J_P(m^{\Delta t}) = \lambda_j f_j'(m_j^n) + \sum_{k=1}^{N_E} \lambda_k \frac{1}{h^n(P_j)} q_{kh}^n(P_j)$$

- *Paso 3:* Hacer  $\nabla J_P(m^{\Delta t}) = (\nabla_1 J_P(m^{\Delta t}), \dots, \nabla_{N_E} J_P(m^{\Delta t})) \in L^{\Delta t}$  dado por

$$\nabla_j J_P(m^{\Delta t})|_{(t^{n-1}, t^n]} = \partial_{j_n} J_P(m^{\Delta t})$$

### 3.3. Resultados Numéricos

El Problema I ha sido resuelto en una situación realista planteada en la ría de Vigo (ver Figura 3.1), una de las zonas más pobladas e industrializadas del Noroeste de España.

Para hacer los experimentos numéricos hemos considerado dos plantas depuradoras y dos zonas a proteger, cada una de ellas asociada a una planta (esto es,  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ ). Hemos asumido que la zona  $A_1$  es más *sensible* que la zona  $A_2$  y, consecuentemente, el umbral de CF elegido para la zona  $A_1$  se ha tomado menor que el correspondiente a la zona  $A_2$  ( $\sigma_1 = 0.0003$  y  $\sigma_2 = 0.0005$ ). En cuanto al proceso de depuración, no hemos hecho ninguna diferencia entre las plantas (ni en lo que se refiere a las restricciones propias del proceso, ni en lo referente al coste por depuración), de tal modo que hemos considerado  $\underline{m}_1 = \underline{m}_2 = 1$ ,  $\overline{m}_1 = \overline{m}_2 = 150$  y

$$f_1(x) = f_2(x) = \begin{cases} \frac{100(150)^3}{x^3 - 3(150)x^2 + 3(150)^2x}, & \text{si } x \leq 150, \\ 100, & \text{si } x > 150. \end{cases} \quad (3.84)$$

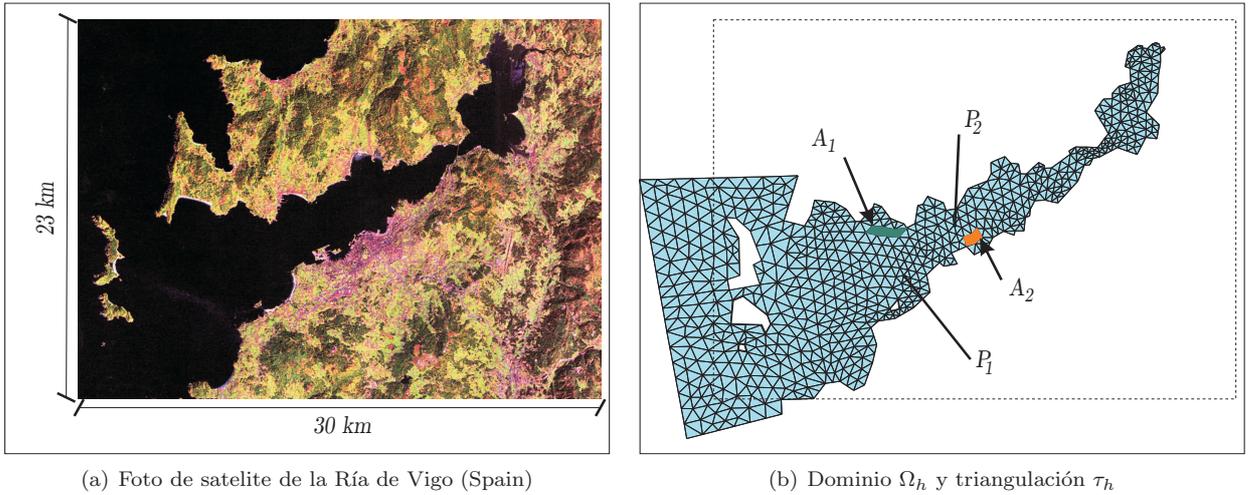


Figura 3.1: Dominio de los experimentos numéricos

Para hacer la simulación, el dominio poligonal  $\Omega_h$  y la malla  $\tau_h$  que hemos utilizado pueden verse en la Figura 3.1(b), donde además se muestran la ubicación de las zonas a proteger y de los puntos de vertido.

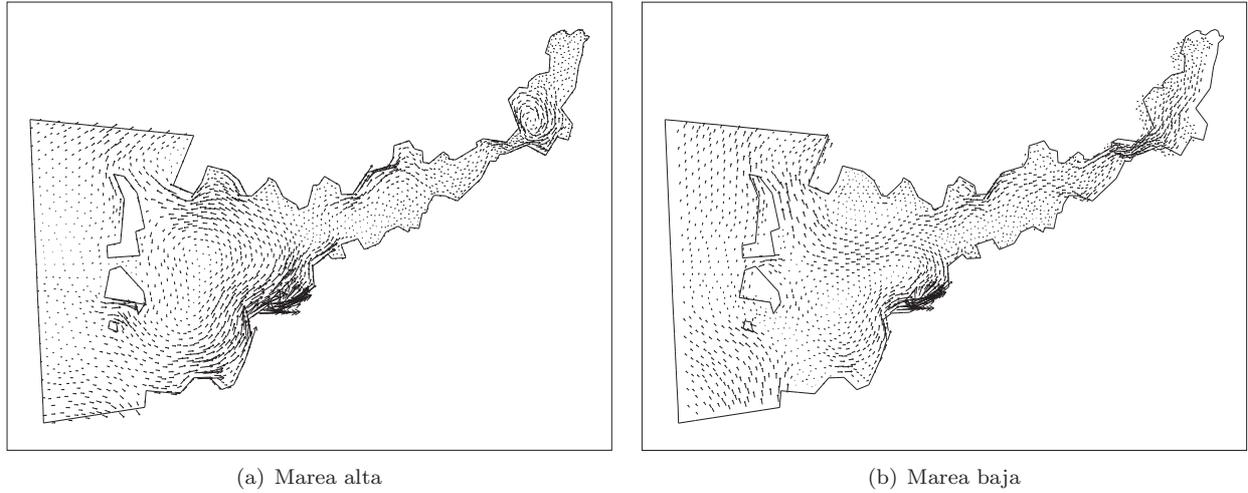


Figura 3.2: Campo de velocidades

En cuanto al dominio temporal, hemos considerado un ciclo de marea estándar de 6 horas ( $T=21600$  s), dividido en  $N = 120$  subintervalos ( $\Delta t = 180$ ). Además, hemos supuesto que inicialmente la concentración de CF era nula ( $\rho_0 = 0$ ) y hemos usado los campos de altura  $h(x, t)$  y velocidad  $\vec{u}(x, t)$  obtenidos al resolver las ecuaciones de aguas poco profundas en este mismo dominio  $\Omega_h$  (en la figura 3.2 pueden verse el campo de velocidades utilizado, en dos instantes característicos - marea alta y marea baja - mientras que una descripción detallada, tanto del modelo de aguas poco profundas empleado, como del método numérico utilizado para resolverlo, puede verse en [18]). Finalmente, los coeficientes de viscosidad y mortandad de CF que hemos manejado han sido, respectivamente,  $\beta = 2000m^2s^{-1}$  y  $\kappa = 1.15 \times 10^{-15}m^2s^{-1}$

Mostramos a continuación los resultados obtenidos, organizados de la siguiente manera:

1. En la sección 3.3.1 se presentan los resultados alcanzados cuando se busca un equilibrio de Nash siguiendo el método descrito en la sección 3.1.4
2. En la sección 3.3.2 se ilustra todo lo relacionado con la obtención de un frente Pareto.
3. Finalmente, en la sección 3.3.3 se incluyen resultados para hacer comparaciones a dos niveles diferentes. Por una parte se trata de ilustrar las diferencias que hay entre utilizar el problema adjunto o usar directamente sensibilidades, y, por otra parte, se trata de comparar, en un escenario no cooperativo, soluciones cooperativas (óptimos Pareto) frente a una estrategia no cooperativa (equilibrio de Nash) para ver si en este Problema I algún tipo de cooperación podría ser posible.

### 3.3.1. Estudio no cooperativo: Equilibrio de Nash

A la hora de obtener un equilibrio de Nash, y con la intención de observar el efecto que sobre ese equilibrio tienen las *multas* por depuración insuficiente, realizamos diferentes experimentos para diferentes valores de los parámetros que miden la penalización ( $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$ ).

En primer lugar tomamos  $\epsilon_1 = \epsilon_2$  y vamos haciendo decrecer su valor, es decir, aumentando la penalización por igual en ambas zonas. Las figuras 3.3, 3.4 y 3.5 se corresponden con un aumento progresivo de la penalización, y en cada una de ellas se muestra, junto el equilibrio de Nash obtenido, las concentraciones de CF correspondientes a esa estrategia de vertido, en la vecindad de las zonas a proteger y en el último paso de tiempo.

Como cabía esperar, la imposición de una mayor penalización (valores cada vez menores de  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$ ) se corresponde con vertidos más pequeños y, consecuentemente, en las zonas a proteger, las concentraciones de CF se aproximan más a los umbrales permitidos  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$ . Se observa además que el aumento de la penalización no afecta por igual a las dos plantas: cuando se pasa de una penalización de  $10^{-3}$  (figura 3.4) a una de  $10^{-6}$  (figura 3.5), la planta 2 baja mucho su vertido (aumenta mucho su depuración), lo que permite a la planta 1 mantener en su zona concentraciones de CF por debajo del umbral máximo, sin apenas disminuir su vertido.

En un segundo experimento tomamos  $\epsilon_1 > \epsilon_2$ , es decir, consideramos que en la zona  $\overline{A}_2$  se penaliza más la concentración excesiva de CF que en la zona  $\overline{A}_1$ . Lo que ocurre en esta situación se muestra en la Fig. 3.6. Si comparamos esta figura con la figura 3.3 (en la que sobre  $\overline{A}_2$  se tiene la misma penalización que sobre  $\overline{A}_1$ ) observamos que la planta más penalizada (planta 2) se ve obligada a llevar una estrategia de depuración más intensa (menores vertidos) consiguiendo así una menor concentración de CF en su zona. Además, esa estrategia de depuración favorece a la planta 1 que, sin apenas cambiar su vertido con respecto a cuando ambas zonas estaban igual de penalizadas, consigue que ahora en su zona la concentración de CF se aproxime más al umbral  $\sigma_1$ .

### 3.3.2. Estudio cooperativo: Optimalidad de Pareto

Para obtener el frente Pareto tomamos como parámetros de penalización  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-6}$  y consideramos los siguientes valores para las constantes del Algoritmo 3 (algoritmo SPG):  $R = 10$ ,  $\alpha_{min} = 10^{-15}$ ,  $\alpha_{max} = 10^{15}$ ,  $\gamma = 10^{-4}$ ,  $\nu_1 = 0,1$ ,  $\nu_2 = 0,9$  y  $\epsilon = 10^{-5}$ .

En la Tabla 3.1 mostramos los valores de los funcionales objetivo  $J_1$  y  $J_2$  evaluados en las soluciones óptimo-Pareto correspondientes a los pesos generados por el Algoritmo 2 con  $N_p = 10$ .

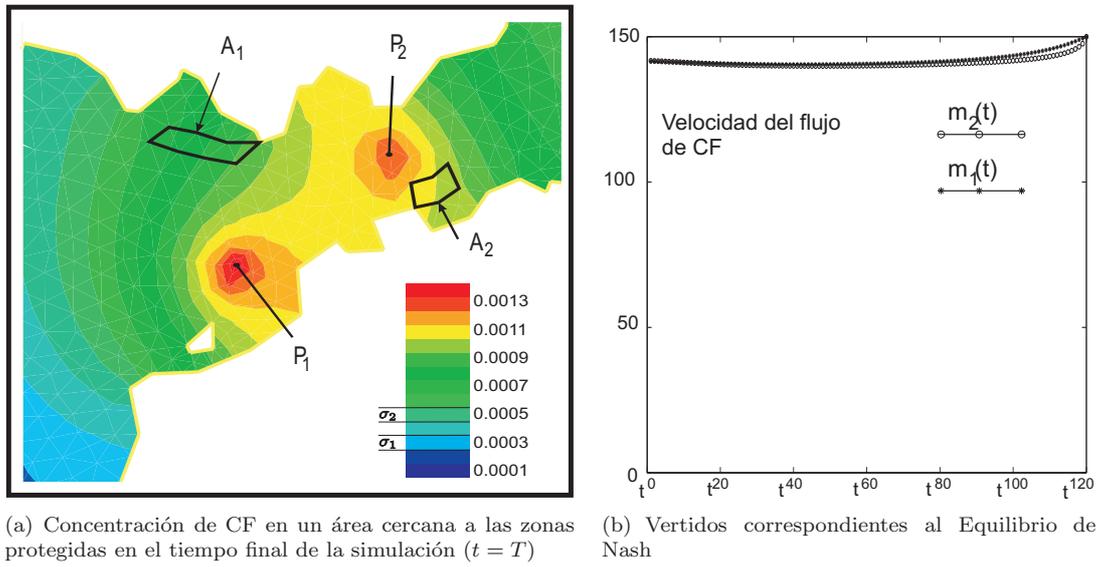


Figura 3.3: Resultados numéricos correspondientes a  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$

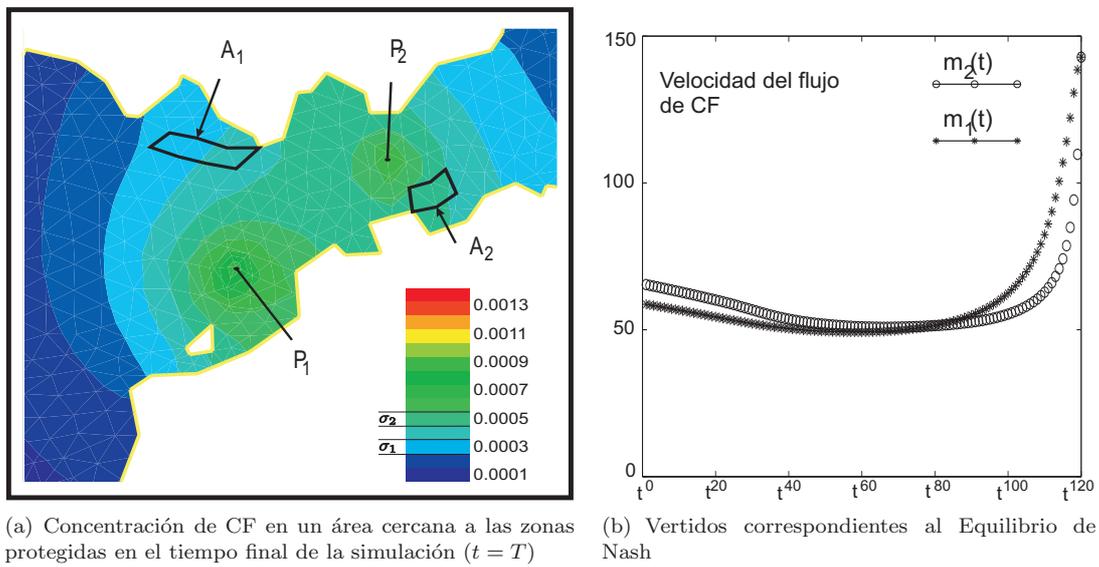


Figura 3.4: Resultados numéricos correspondientes a  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-3}$

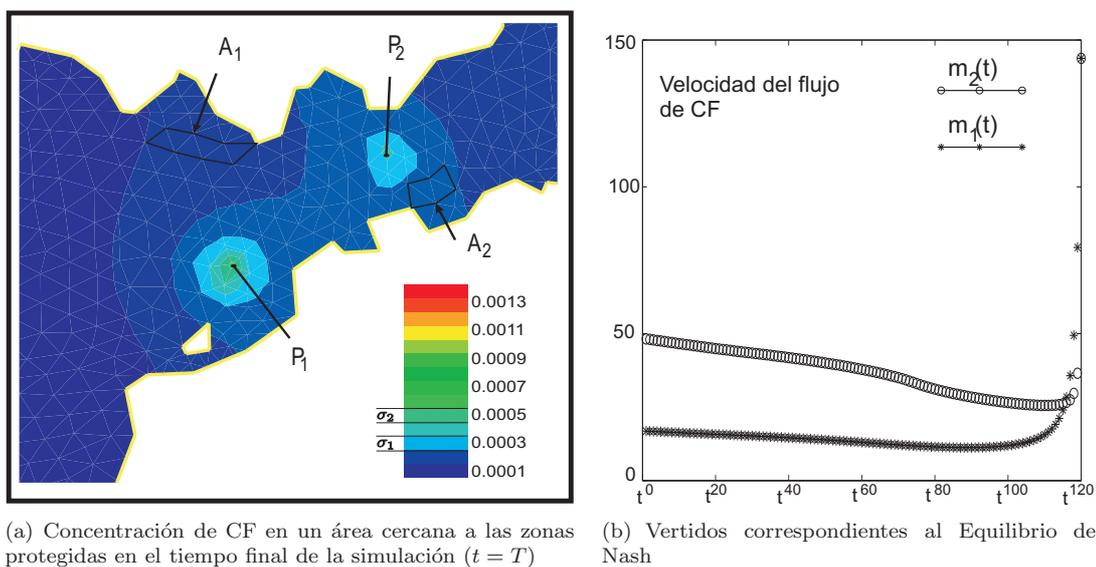


Figura 3.5: Resultados numéricos correspondientes a  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-6}$

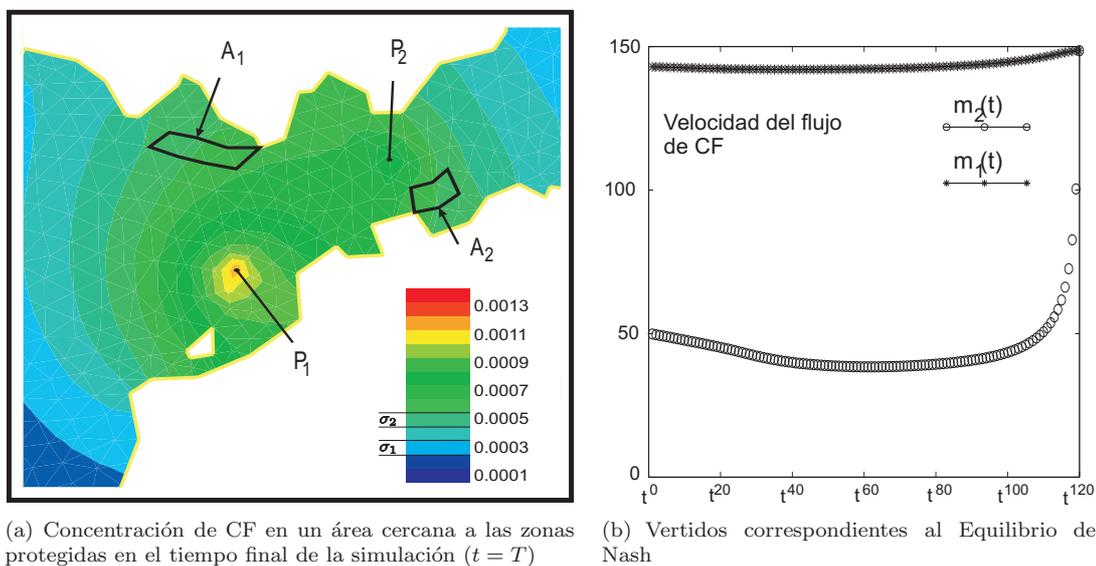


Figura 3.6: Resultados numéricos correspondientes a  $\epsilon_1 = 1, \epsilon_2 = 10^{-3}$

Al analizar los valores de la tabla 3.1 que se corresponden con los casos extremos  $\lambda^0 = (1, 0)$  (minimizar  $J_1$  sin preocuparse de  $J_2$ ) y  $\lambda^{10} = (0, 1)$  (minimizar  $J_2$  sin preocuparse de  $J_1$ ) observamos que el valor de  $(b)$  (coste de la depuración en la planta 2) correspondiente a  $\lambda^0$ , es igual al valor de  $(a)$  (coste por depuración en la planta 1) correspondiente a  $\lambda^{10}$ . Más aún, ese valor es igual a  $\int_0^T f_j(1)dt$  y ello se debe a que, si no damos importancia al coste económico asociado a la planta  $j$ , obviamente la mejor opción consiste en maximizar la depuración en esa planta y, consecuentemente, la solución óptimo-Pareto correspondiente satisface  $m_j^{\Delta t} \equiv \underline{m}_j = 1$ .

El buen comportamiento del algoritmo al generar soluciones óptimo-Pareto se muestra en la Figura 3.7, donde puede verse el frente Pareto correspondiente a las soluciones numéricas obtenidas, que presenta una clara forma convexa.

Por otra parte, las soluciones óptimo-Pareto correspondientes a los pesos  $\lambda^1 = (0.9, 0.1)$ ,  $\lambda^5 = (0.5, 0.5)$  y  $\lambda^9 = (0.1, 0.9)$  pueden verse, respectivamente, en las Figuras 3.8(b), 3.9(b) y 3.10(b). Al lado de cada óptimo-Pareto (Figuras 3.8(a), 3.9(a) y 3.10(a)) se muestra, en un área cercana a las zonas protegidas y en el último instante de la simulación, las concentraciones de CF correspondientes a esa estrategia de vertido.

Analizando esas figuras y los valores de la Tabla 3.1 se observa que la solución asociada al peso  $\lambda^5$  es la mejor *económicamente hablando*, ya que es la que presenta los menores costes totales (suma de  $J_1 + J_2$ ). Tomando como referencia esa solución, se aprecia que el óptimo asociado a  $\lambda^1$  representa una mejor alternativa desde el punto de vista ecológico (lleva a una menor concentración de CF en ambas zonas) a costa de aumentar la depuración en la planta 2. Por el contrario, si comparamos la estrategia asociada a  $\lambda^5$  con la asociada a  $\lambda^9$  observamos que las concentraciones de CF que se tienen son similares, si bien, como cabía esperar, el vector de pesos  $\lambda^9$  propone una depuración más intensa en la planta 1 y menos fuerte en la planta 2.

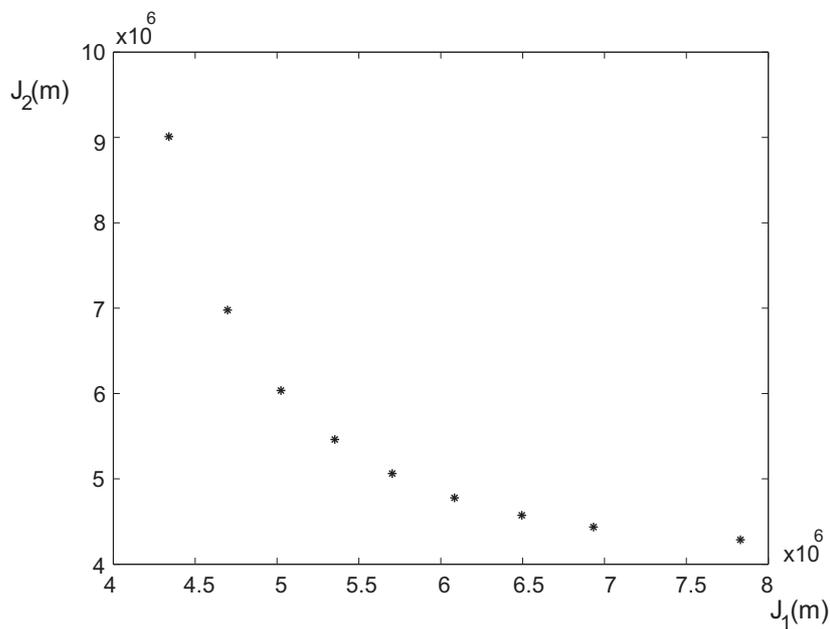
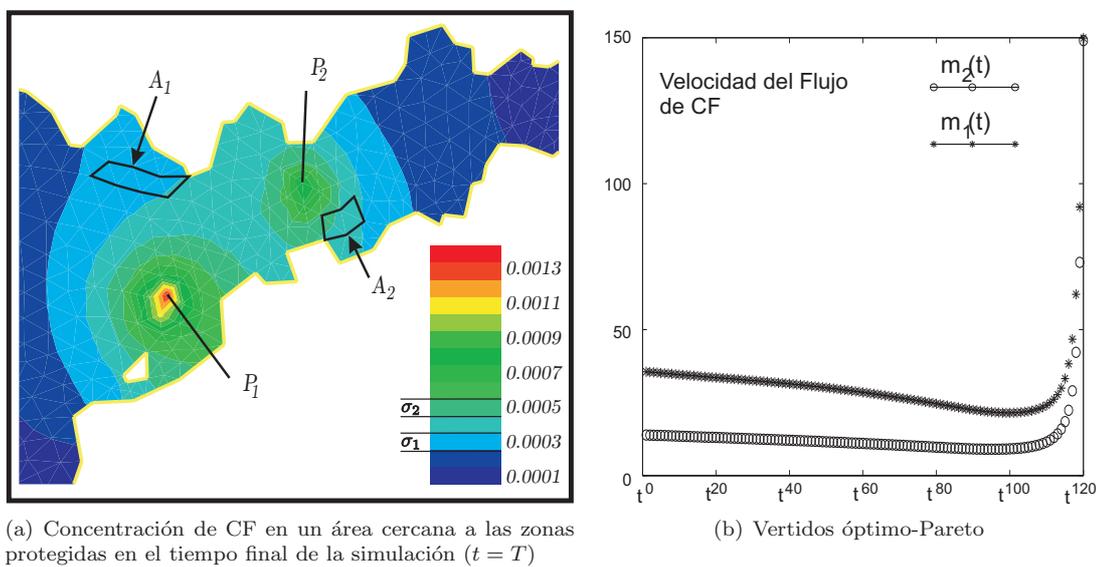


Figura 3.7: Frente Pareto



(a) Concentración de CF en un área cercana a las zonas protegidas en el tiempo final de la simulación ( $t = T$ )

(b) Vertidos óptimo-Pareto

Figura 3.8: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda^1 = (0.9, 0.1)$

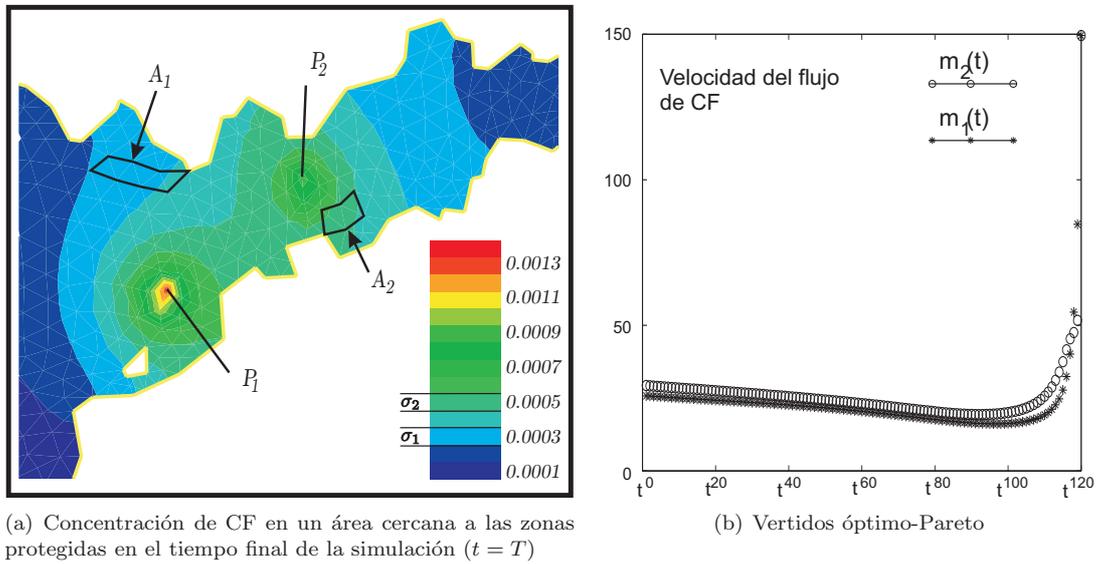


Figura 3.9: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda^5 = (0.5, 0.5)$

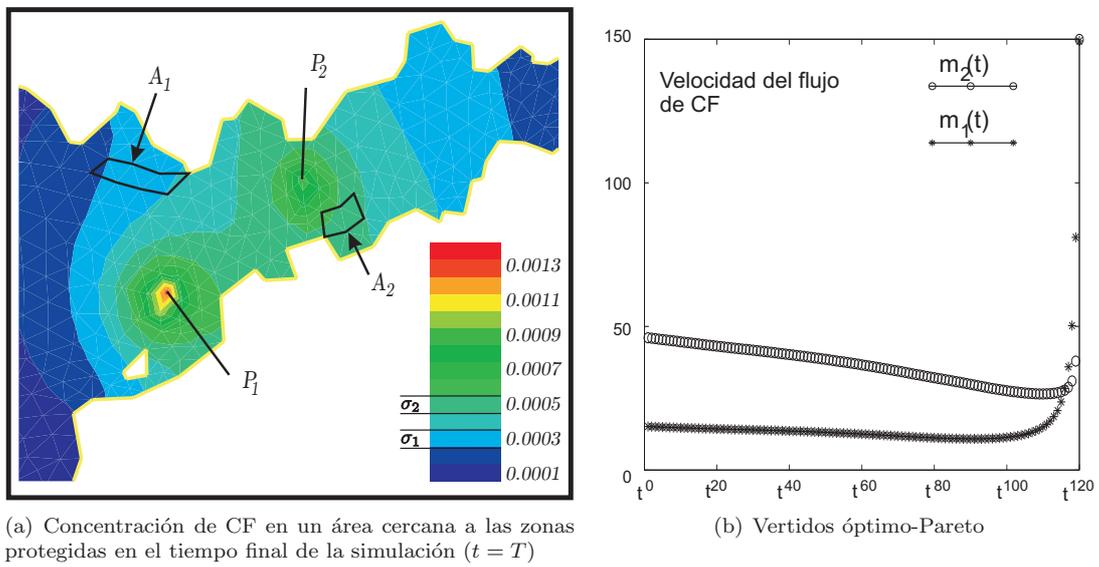


Figura 3.10: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda^9 = (0.1, 0.9)$

$\lambda^i$	(a)	(b)	(c)	(d)	$J_1(m^{\Delta t})$	$J_2(m^{\Delta t})$
(1,0)	3.5782	108.723	0.0870	0	$3.6652 \times 10^6$	$10.8723 \times 10^6$
(0.9,0.1)	4.1702	8.9757	0.1697	0.0342	$4.3400 \times 10^6$	$9.0099 \times 10^6$
(0.8,0.2)	4.4745	6.8830	0.2230	0.0936	$4.6976 \times 10^6$	$6.9766 \times 10^6$
(0.7,0.3)	4.7488	5.9015	0.2748	0.1336	$5.0236 \times 10^6$	$6.0351 \times 10^6$
(0.6,0.4)	5.0246	5.2872	0.3283	0.1734	$5.3530 \times 10^6$	$5.4607 \times 10^6$
(0.5,0.5)	5.3200	4.8529	0.3832	0.2101	$5.7033 \times 10^6$	$5.0630 \times 10^6$
(0.4,0.6)	5.6506	4.5317	0.4332	0.2459	$6.0838 \times 10^6$	$4.7776 \times 10^6$
(0.3,0.7)	6.0359	4.2969	0.4590	0.2763	$6.4949 \times 10^6$	$4.5733 \times 10^6$
(0.2,0.8)	6.5266	4.1360	0.4065	0.2993	$6.9332 \times 10^6$	$4.4354 \times 10^6$
(0.1,0.9)	7.6190	3.9777	0.2113	0.3077	$7.8303 \times 10^6$	$4.2854 \times 10^6$
(0,1)	108.723	3.5058	0	0.2212	$108.723 \times 10^6$	$3.7270 \times 10^6$

Cuadro 3.1: Resultados numéricos: (a) =  $10^{-6} \int_0^T f_1(m^{\Delta t}) dt$ , (b) =  $10^{-6} \int_0^T f_2(m_2^{\Delta t}) dt$ , (c) =  $\Delta t \sum_{n=1}^N \int_{A_1} (\rho_h^n(m^{\Delta t}) - \sigma_1)_+^2 dx$ , y (d) =  $\Delta t \sum_{n=1}^N \int_{A_2} (\rho_h^n(m^{\Delta t}) - \sigma_2)_+^2 dx$ .

### 3.3.3. Comparaciones

En la presente Sección realizamos dos tipos de comparaciones diferentes. Por una parte comparamos los resultados que se obtienen cuando se busca el equilibrio de Nash resolviendo el sistema de optimalidad expresado a partir del sistema adjunto (ver sección 3.1.4), con el que se obtiene utilizando directamente las sensibilidades (ver sección 3.1.5). Por otra parte se trata de comparar, en un escenario no cooperativo, los resultados proporcionados por una estrategia no cooperativa (un equilibrio de Nash) con los resultados proporcionados por estrategias cooperativas (óptimos-Pareto), para ver si en este problema la *cooperación* supone, o no, una mejora considerable.

### Sensibilidades vs. Adjuntos

Para comparar las dos alternativas descritas en las secciones 3.1.4 y 3.1.5 a la hora de obtener un equilibrio de Nash para el Problema I fijamos parámetros de penalización  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-6}$  y tomamos como nuevo umbral de CF en la zona  $\bar{A}_1$   $\sigma_1 = 0.000348$ . Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 3.2. En ella observamos que los cambios en cuanto al coste por depuración en las plantas 1 y 2 (valores (a) y (b), respectivamente) son ligeros, con un coste mayor para el caso de las sensibilidades; sin embargo, en cuanto a las penalizaciones (valores (c) y (d), respectivamente) observamos una diferencia (de hasta un orden de magnitud) en la penalización para la planta 2, que hace que el funcional objetivo  $J_2$  sea notablemente diferente en comparación con su contraparte  $J_2$  obtenida por métodos que involucran al problema adjunto.

Otro hecho notable es que el uso de la sensibilidades implica un coste máquina algo mayor que el uso del problema adjunto, esto sin considerar el tiempo para la obtención de la matriz de *sensibilidades* que definimos en la Sección 3.1.5

Las gráficas de los Equilibrios de Nash obtenidos por ambas alternativas pueden verse en la Figura 3.11, donde se observa que ambas soluciones son muy similares, apreciándose las únicas diferencias en los últimos instantes de la simulación.

Para finalizar, conviene destacar que al hacer este test hemos apreciado también que, para penalizaciones elevadas, pequeñas variaciones en cualquiera de las cotas máximas de CF pueden provocar cambios importantes en las estrategias de vertido de todas las plantas. En efecto, la única diferencia entre el test que da como resultado el equilibrio mostrado en la figura 3.5(b) y el que se muestra en la figura 3.11(a) es que para la primera se tomó  $\sigma_1 = 0.0003$  y para la segunda  $\sigma_1 = 0.000348$ . Como se aprecia perfectamente al comparar ambas gráficas, el ser *más permisivo* en la zona  $\bar{A}_1$  le permite a su planta asociada (planta 1) verter más y, consecuentemente, eso provoca que en la otra planta (planta 2) se deba disminuir el vertido, para evitar que la concentración de CF en su zona asociada (zona  $\bar{A}_2$ ) supere con creces el umbral máximo permitido.

### Cooperativo vs. No cooperativo

Nos planteamos ahora, de nuevo, el Problema I bajo una óptica no cooperativa, con todas las consideraciones descritas al principio de esta sección y parámetros de penalización  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-3}$ . La estrategia de vertido dada por el equilibrio de Nash  $m^*$  ya ha sido mostrada en la figura 3.4. Las preguntas que nos hacemos ahora son: ¿es esta la mejor solución?, ¿hay alguna estrategia de vertido que sea mejor para ambas plantas?. Dicho de otro modo, ¿es este equilibrio de Nash  $m^*$  un óptimo-Pareto?. De no ser eso cierto, podría ser útil encontrar los óptimos-Pareto que proporcionen a ambas plantas una estrategia mejor que el equilibrio de Nash. La existencia de esos óptimos-Pareto podría llevar a las plantas a la búsqueda de un acuerdo, modificándose la óptica no cooperativa que inicialmente mostraba el problema.

Con este objetivo en mente, generamos un frente Pareto para el problema, con  $N_p = 10$  vectores de pesos. En la tabla 3.3 se muestran los costes correspondientes a los óptimos-Pareto obtenidos y en la Figura 3.12 se puede ver el frente Pareto (sin los puntos extremos), así como el coste correspondiente al equilibrio de Nash  $m^*$  (punto  $(J_1(m^*), J_2(m^*))$ ). Como se puede apreciar fácilmente, en este caso el punto de equilibrio no es un óptimo-Pareto, por lo que la optimalidad de Pareto provee infinidad de opciones que mejoran, en ambas plantas, los resultados que proporciona el equilibrio de Nash.

	$i$	$f - eval$	(a)	(b)	(c)	(d)	$J_1(m^{\Delta t})$	$J_2(m^{\Delta t})$
<i>Sensibilidades</i>	72	73	6.3518	4.1803	0.5371	0.0639	$6.8890 \times 10^6$	$4.2443 \times 10^6$
<i>Estado adjunto</i>	52	53	6.2793	4.1529	0.6328	0.3186	$6.9122 \times 10^6$	$4.4716 \times 10^6$

Cuadro 3.2: Resultados obtenidos en base al estado adjunto y a las sensibilidades:  $i$  iteraciones realizadas,  $f - eval$  evaluaciones de la función, (a) =  $10^{-6} \int_0^T f_1(m_1^{\Delta t}) dt$ , (b) =  $10^{-6} \int_0^T f_2(m_2^{\Delta t}) dt$ , (c) =  $\Delta t \sum_{n=1}^N \int_{A_1} (\rho_h^n - \sigma_1)_+^2 dx$ , y (d) =  $\Delta t \sum_{n=1}^N \int_{A_2} (\rho_h^n - \sigma_2)_+^2 dx$ .

Para determinar con mayor precisión el arco del frente que supone una mejora respecto al equilibrio obtenido, generamos más pesos entre los dados por  $\lambda^5$  y  $\lambda^8$ , y el resultado obtenido se muestra en la figura 3.12(b). En esa figura se destaca el punto del frente que se corresponde con una mejora similar (en cuanto a disminución de costes) para ambas plantas. El óptimo-Pareto correspondiente (asociado al vector de pesos  $\lambda = (0.325, 0.675)$ ), se puede presentar como una solución cooperativa, alternativa al equilibrio de Nash. Estas dos soluciones alternativas, representadas en la figura 3.13, se comparan, en términos de costes de depuración y penalización, en la tabla 3.4.

Las concentraciones de CF, correspondientes a esas dos estrategias de vertido diferentes, pueden verse (en el último instante de la simulación y en la vecindad de las zonas a proteger) en la Figura 3.14. Como las diferencias aquí no son fáciles de observar, hemos considerado un punto significativo en cada una de las zonas (la localización exacta de esos puntos  $a_1 \in \bar{A}_1$  y  $a_2 \in \bar{A}_2$  puede verse en la figura 3.14) y comparado, para ambas estrategias de vertido, las concentraciones de CF en esos puntos a lo largo del tiempo (ver figura 3.15).

Para finalizar, y como resumen de todo lo expuesto en esta comparativa, indicar que el equilibrio de Nash puede plantearse como un punto de partida para una posible cooperación entre plantas. Esa cooperación puede verse favorecida por la existencia de un óptimo-Pareto que proporciona una *mejora* considerable y similar (en términos de reducción de coste) para ambas plantas. En el ejemplo estudiado, analizando con detalle la tabla 3.4 y la figura 3.13, se observa que los cambios para pasar del equilibrio a ese óptimo-Pareto consisten en una leve disminución de la depuración en la planta 2 y un aumento (y consecuentemente un mayor gasto) en la planta 1. Tal y como se pone de manifiesto en la figura 3.15, esa mayor depuración supone una mejora ecológica importante (reducción del gasto por penalización), no sólo en la zona 1, sino también en la zona 2.

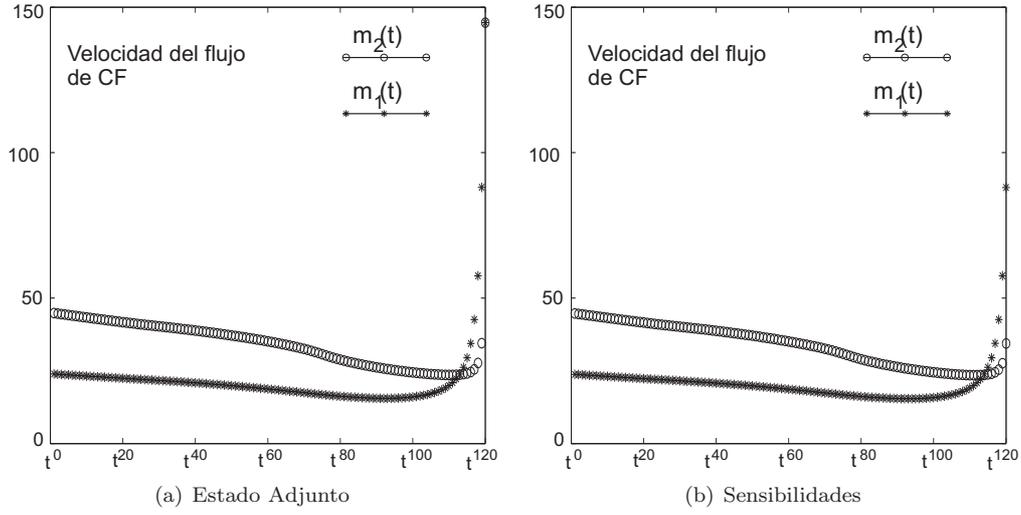


Figura 3.11: Vertidos correspondientes a un Equilibrio de Nash

$\lambda^i$	(a)	(b)	(c)	(d)	$J_1(m^{\Delta t})$	$J_2(m^{\Delta t})$
(1,0)	2.5180	108.72	0.2179	0	$2.7359 \times 10^6$	$108.72 \times 10^6$
(0.9,0.1)	2.6600	4.4240	0.3763	0.1017	$3.0363 \times 10^6$	$4.5258 \times 10^6$
(0.8,0.2)	2.7257	3.6288	0.4275	0.1944	$3.1532 \times 10^6$	$3.8233 \times 10^6$
(0.7,0.3)	2.7849	3.3102	0.4490	0.2667	$3.2339 \times 10^6$	$3.5770 \times 10^6$
(0.6,0.4)	2.8483	3.1346	0.4507	0.3203	$3.2991 \times 10^6$	$3.4550 \times 10^6$
(0.5,0.5)	2.9253	3.0203	0.4360	0.3577	$3.3614 \times 10^6$	$3.3780 \times 10^6$
(0.4,0.6)	3.0297	2.9366	0.4054	0.3805	$3.4351 \times 10^6$	$3.3172 \times 10^6$
(0.3,0.7)	3.1890	2.8683	0.3563	0.3888	$3.5454 \times 10^6$	$3.2572 \times 10^6$
(0.2,0.8)	3.4765	2.8056	0.2833	0.3801	$3.7599 \times 10^6$	$3.1858 \times 10^6$
(0.1,0.9)	4.1925	2.7372	0.1752	0.3462	$4.3678 \times 10^6$	$3.0834 \times 10^6$
(0,1)	108.72	2.5915	0.0004	0.1268	$108.73 \times 10^6$	$2.8083 \times 10^6$

Cuadro 3.3: Resultados numéricos: (a) =  $10^{-6} \int_0^T f_1(m_1^{\Delta t}) dt$ , (b) =  $10^{-6} \int_0^T f_2(m_2^{\Delta t}) dt$ , (c) =  $\Delta t \sum_{n=1}^N \int_{A_1} (\rho_h^n(m^{\Delta t}) - \sigma_1)_+^2 dx$ , y (d) =  $\Delta t \sum_{n=1}^N \int_{A_2} (\rho_h^n(m^{\Delta t}) - \sigma_2)_+^2 dx$ .

	(a)	(b)	(c)	(d)	$J_1(m^{\Delta t})$	$J_2(m^{\Delta t})$
Equilibrio de Nash	2.8749	2.8567	0.7296	0.5129	$3.60 \times 10^6$	$3.37 \times 10^6$
Óptimo-Pareto $\lambda = (0,325, 0,675)$	3.1414	2.8845	0.3705	0.3882	$3.51 \times 10^6$	$3.27 \times 10^6$

Cuadro 3.4: Comparación entre las dos soluciones propuestas dadas en la Figura 3.13: (a) =  $10^{-6} \int_0^T f_1(m_1^{\Delta t}) dt$ , (b) =  $10^{-6} \int_0^T f_2(m_2^{\Delta t}) dt$ , (c) =  $\Delta t \sum_{n=1}^N \int_{A_1} (\rho_h^n - \sigma_1)_+^2 dx$ , y (d) =  $\Delta t \sum_{n=1}^N \int_{A_2} (\rho_h^n - \sigma_2)_+^2 dx$ .

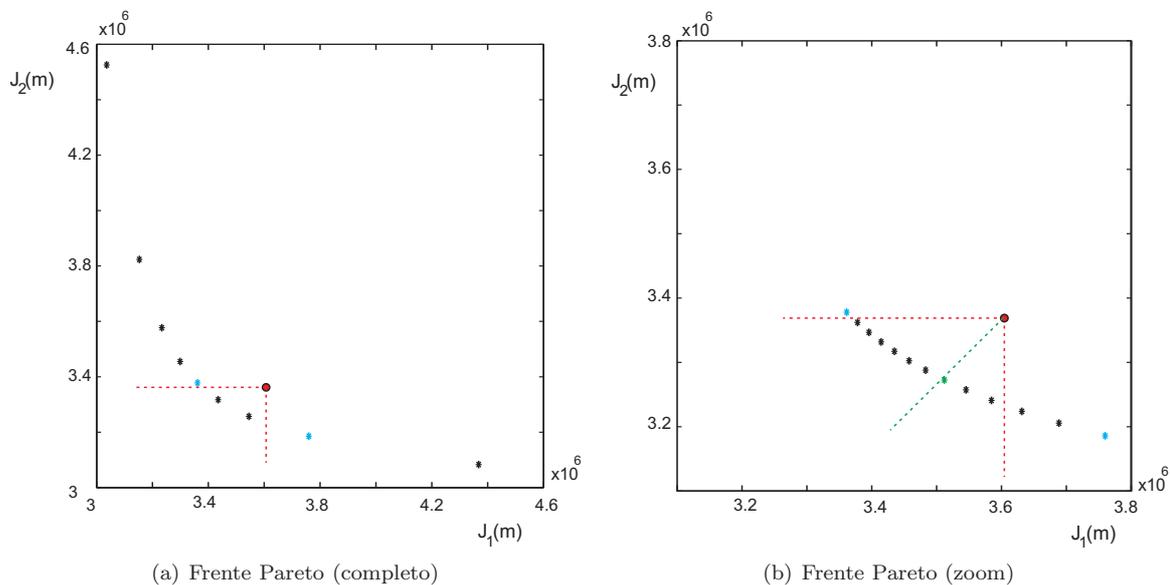


Figura 3.12: Frente Pareto y coste correspondiente al Equilibrio de Nash

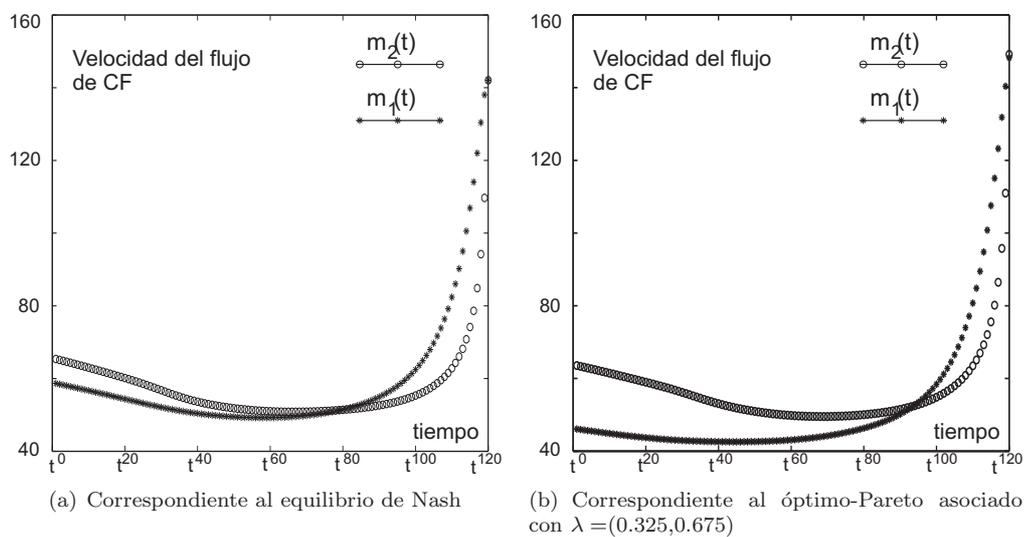
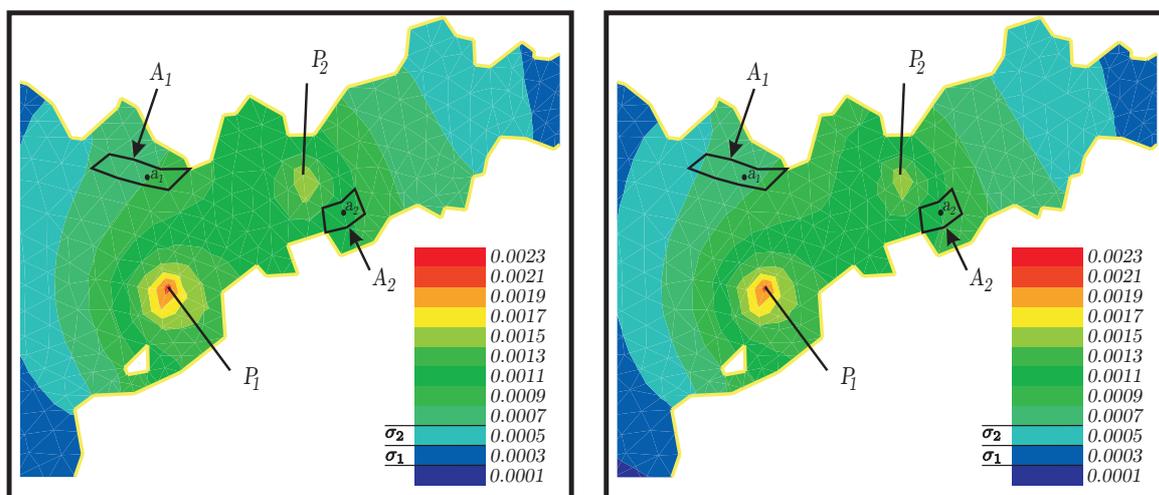


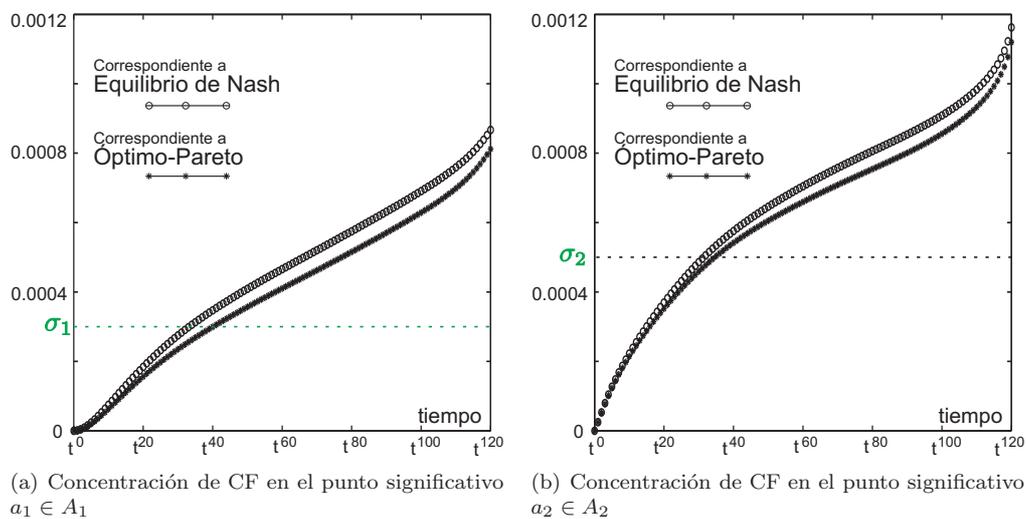
Figura 3.13: Estrategias de vertido



(a) Concentración de CF correspondiente a la estrategia de vertido dada por el equilibrio de Nash representado en la figura 3.13(a)

(b) Concentración de CF correspondiente a la estrategia de vertido dada por la solución óptimo-Pareto representada en la figura 3.13(b)

Figura 3.14: Concentración de CF en un área cercana a las zonas protegidas en el tiempo final de la simulación  $t = T$



(a) Concentración de CF en el punto significativo  $a_1 \in A_1$

(b) Concentración de CF en el punto significativo  $a_2 \in A_2$

Figura 3.15: Concentración de CF a lo largo de todo el intervalo de simulación en puntos significativos dentro de las zonas protegidas

## Capítulo 4

# Problema I (Discreto vs. Continuo)

En el capítulo anterior hemos estudiado el Problema I desde uno de los posibles puntos de partida: Para llegar a su solución primero desarrollamos un modelo continuo teórico y posteriormente procedimos a su discretización. Una alternativa a esto es plantear, desde un inicio, la discretización del problema y, posteriormente, analizar y resolver ese problema discreto. Es conocido (ver, por ejemplo, [44]) que estas dos alternativas no necesariamente tienen que dar los mismos resultados. Es por ello que dedicamos este capítulo a formular el problema discreto y a estudiarlo bajo los esquemas no cooperativo y cooperativo, para finalmente realizar una comparación con los resultados obtenidos en el capítulo anterior.

### 4.1. Formulación matemática del problema discreto

Para formular el Problema I en su versión discreta, recordamos brevemente la discretización introducida en el capítulo anterior: Fijado  $N \in \mathbb{N}$ , se define el paso de tiempo  $\Delta t = \frac{T}{N}$  y se consideran los tiempos discretos  $t^n = n\Delta t$  para  $n = 0, 1, \dots, N$ .

Para cada  $j = 1, \dots, N_E$  el conjunto de controles admisibles  $M_j$  es aproximado por el espacio de dimensión finita  $M_j^{\Delta t}$  definido en (3.52) del siguiente modo

$$M_j^{\Delta t} = \{m_j^{\Delta t} \in M_j \text{ tal que } m_j^{\Delta t}|_{(t^{n-1}, t^n]} \in P_0, n = 1, 2, \dots, N\}$$

Además, nuevamente señalamos que cada  $m_j^{\Delta t} \in M_j^{\Delta t}$  está unívocamente determinado por un vector  $\tilde{m}_j = (m_j^1, m_j^2, \dots, m_j^N)^T \in [\underline{m}_j, \overline{m}_j]^N$  definido por:

$$m_j^{\Delta t}|_{(t^{n-1}, t^n]}(t) = m_j^n, \quad n = 1, \dots, N.$$

Esto nos lleva a definir  $\tilde{M}_j = [\underline{m}_j, \overline{m}_j]^N$ ,  $\tilde{M} = \prod_{j=1}^{N_E} \tilde{M}_j$  y considerar, para cada  $j =$

$1, \dots, N_E$ , el funcional discreto

$$\begin{aligned} \tilde{J}_j & : \quad \tilde{M} \subset \mathbb{R}^{NN_E} & \longrightarrow & \quad \mathbb{R} \\ & & & \\ \tilde{m} = (\tilde{m}_1, \dots, \tilde{m}_{N_E}) & \longrightarrow & \tilde{J}_j(\tilde{m}) \end{aligned}$$

definido como:

$$\tilde{J}_j(\tilde{m}) = \Delta t \sum_{n=1}^N f_j(m_j^n) + \sum_{l=n_{(j-1)+1}}^{n_j} \frac{1}{2\epsilon_l} \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \int_{A_l} (\rho_h^{n+1} - \sigma_l)_+^2 dx, \quad (4.1)$$

donde, para  $\rho_h^0 \in V_h$  dado,  $\rho_h^{n+1} \in V_h$ ,  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , es la única solución del problema de estado discreto (3.47).

Tomando en cuenta todo esto, el Problema I se formula, en su versión discreta, como

$$\begin{cases} \text{Minimizar } \tilde{J}(\tilde{m}) = (\tilde{J}_1(\tilde{m}), \dots, \tilde{J}_{N_E}(\tilde{m}))^T \\ \text{sujeto a } \tilde{m} \in \tilde{M}. \end{cases} \quad (4.2)$$

## 4.2. Estudio no cooperativo: Equilibrio de Nash

Recordemos, para fijar conceptos, la definición de equilibrio de Nash para el problema discreto (4.2):

**Definición 13** Para el juego definido por el funcional de evaluación  $\tilde{J}$  del problema de optimización multiobjetivo dado por (4.2), un vector de decisión  $\tilde{m}^* = (\tilde{m}_1^*, \dots, \tilde{m}_{N_E}^*) \in \tilde{M}$  es un equilibrio de Nash si satisface

$$\tilde{J}_j(\tilde{m}_1^*, \dots, \tilde{m}_j^*, \dots, \tilde{m}_{N_E}^*) \leq \tilde{J}_j(\tilde{m}_1^*, \dots, \tilde{m}_j, \dots, \tilde{m}_{N_E}^*), \quad \forall \tilde{m}_j \in \tilde{M}_j, \quad (4.3)$$

para cada  $j = 1, \dots, N_E$ .

### 4.2.1. Existencia de solución

De nuevo supondremos a lo largo de esta sección que  $f_j \in C([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  es estrictamente convexa para todo  $j = 1, \dots, N_E$ . Entonces, atendiendo a que el sistema de estado discreto (3.47) es claramente lineal, es fácil observar que para  $j = 1, \dots, N_E$ , el funcional  $\tilde{J}_j$  definido en (4.1) resulta continuo y estrictamente convexo. Además, dado que  $\tilde{M}_j$  es cerrado, acotado y convexo, fijado un elemento  $(\tilde{m}_1, \dots, \tilde{m}_{j-1}, \tilde{m}_j, \tilde{m}_{j+1}, \dots, \tilde{m}_{N_E}) \in \tilde{M}$ , sabemos que existe un único  $\tilde{m}_j^* \in \tilde{M}_j$  tal que

$$\tilde{J}_j(\tilde{m}_1, \dots, \tilde{m}_{j-1}, \tilde{m}_j^*, \tilde{m}_{j+1}, \dots, \tilde{m}_{N_E}) \leq \tilde{J}_j(\tilde{m}_1, \dots, \tilde{m}_{j-1}, \tilde{m}_j, \tilde{m}_{j+1}, \dots, \tilde{m}_{N_E}), \quad \forall \tilde{m}_j \in \tilde{M}_j$$

Esto nos permite definir la siguiente aplicación:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_j & : \quad \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N_E} \tilde{M}_i & \rightarrow & \tilde{M}_j \\ (\tilde{m}_1, \dots, \tilde{m}_{j-1}, \tilde{m}_{j+1}, \dots, \tilde{m}_{N_E}) & \rightarrow & \tilde{S}_j(\tilde{m}_1, \dots, \tilde{m}_{j-1}, \tilde{m}_{j+1}, \dots, \tilde{m}_{N_E}) = \tilde{m}_j^* \end{aligned}$$

**Lema 5** *La aplicación  $\tilde{S}_j$  es continua.*

**Demostración** Al igual que en la demostración del Lema 3, sin pérdida de generalidad, efectuamos la demostración para el caso  $j = 1$ .

Sean  $\{(\tilde{m}_2^k, \dots, \tilde{m}_{N_E}^k)\}$  una sucesión de elementos de  $\prod_{j=2}^{N_E} \tilde{M}_j$  y  $(\tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E}) \in \prod_{j=2}^{N_E} \tilde{M}_j$  tales que

$$\{(\tilde{m}_2^k, \tilde{m}_3^k, \dots, \tilde{m}_{N_E}^k)\} \rightarrow (\tilde{m}_2, \tilde{m}_3, \dots, \tilde{m}_{N_E}).$$

Utilizando la notación  $\{\tilde{m}_1^{*k}\} = \{\tilde{S}_1(\tilde{m}_2^k, \dots, \tilde{m}_{N_E}^k)\}$  y  $\tilde{m}_1^* = \tilde{S}_1(\tilde{m}_2, \tilde{m}_3, \dots, \tilde{m}_{N_E})$ , lo que tenemos que probar es que

$$\{\tilde{m}_1^{*k}\} \rightarrow \tilde{m}_1^*. \quad (4.4)$$

Debido a que  $\{\tilde{m}_1^{*k}\} \subset \tilde{M}_1$ , entonces existe una subsucesión  $\{\tilde{m}_1^{*k'}\}$  tal que converge a un elemento  $\tilde{m}_1 \in \tilde{M}_1$ . Para verificar (4.4) basta probar que  $\tilde{m}_1 = \tilde{S}_1(\tilde{m}_2, \tilde{m}_3, \dots, \tilde{m}_{N_E})$ , ya que, en ese caso, debido a la unicidad del límite se tendrá que la sucesión entera  $\{\tilde{m}_1^{*k}\}$  converge a  $\tilde{m}_1 = \tilde{m}_1^* \in \tilde{M}_1$ .

Debido a la definición de  $\tilde{S}_1$ , para demostrar que  $\tilde{m}_1 = \tilde{S}_1(\tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E})$  es necesario que se cumpla

$$\tilde{J}_1(\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E}) \leq \tilde{J}_1(\tilde{a}_1, \tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E}), \quad \forall \tilde{a}_1 \in \tilde{M}_1.$$

Si para cada  $n = 0, \dots, N-1$ , denotamos por  $\rho_h^{n+1}(\tilde{m}) \in V_h$  la única solución del problema (3.47) correspondiente a segundo miembro dado por  $\tilde{m}$ , entonces es evidente que para  $\{\tilde{m}^k\} \rightarrow \tilde{m}$  se verifica

$$\{\rho_h^{n+1}(\tilde{m}^k)\} \rightarrow \rho_h^{n+1}(\tilde{m}).$$

Como consecuencia de eso, dado que la sucesión  $\{(\tilde{m}_1^{k'}, \tilde{m}_2^{k'}, \dots, \tilde{m}_{N_E}^{k'})\}$  converge al elemento  $(\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E})$ , se tiene

$$\tilde{J}_1(\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E}) = \lim_{k' \rightarrow \infty} \tilde{J}_1(\tilde{m}_1^{k'}, \tilde{m}_2^{k'}, \dots, \tilde{m}_{N_E}^{k'}),$$

y como para toda  $\tilde{a}_1 \in \tilde{M}_1$  se verifica  $\tilde{J}_1(\tilde{m}_1^{k'}, \tilde{m}_2^{k'}, \dots, \tilde{m}_{N_E}^{k'}) \leq \tilde{J}_1(\tilde{a}_1, \tilde{m}_2^{k'}, \dots, \tilde{m}_{N_E}^{k'})$ , de la continuidad de  $\tilde{J}_1$ , resulta que

$$\tilde{J}_1(\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E}) \leq \lim_{k' \rightarrow \infty} \tilde{J}_1(\tilde{a}_1, \tilde{m}_2^{k'}, \dots, \tilde{m}_{N_E}^{k'}) = \tilde{J}_1(\tilde{a}_1, \tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E}), \quad \forall \tilde{a}_1 \in \tilde{M}_1,$$

tal y como queríamos demostrar.  $\square$

**Teorema 11** Si  $f_j \in C([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  es estrictamente convexa en  $[\underline{m}_j, \overline{m}_j]$  para todo  $j = 1, \dots, N_E$ , entonces el problema (4.2) admite un equilibrio de Nash.

**Demostración** Consideremos la aplicación

$$\begin{aligned} \tilde{S} &: \tilde{M} \rightarrow \tilde{M} \\ \tilde{m} &\rightarrow \tilde{S}(\tilde{m}) \end{aligned}$$

donde

$$\tilde{S}(\tilde{m}) = (\tilde{S}_1(\tilde{m}_2, \tilde{m}_3, \dots, \tilde{m}_{N_E}), \tilde{S}_2(\tilde{m}_1, \tilde{m}_3, \dots, \tilde{m}_{N_E}), \dots, \tilde{S}_{N_E}(\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_{N_E-1})).$$

Evidentemente, un punto fijo de  $\tilde{S}$  es un equilibrio de Nash para el problema (4.2), y la existencia de, al menos, un punto fijo de  $\tilde{S}$  es consecuencia del Teorema de Punto Fijo de Kakutani, puesto que  $\tilde{S}$  es continua y  $\tilde{M}$  es convexo y compacto.  $\square$

#### 4.2.2. Condiciones de optimalidad

Supongamos ahora mayor regularidad para las funciones  $f_j$ , esto es, supongamos que, para  $j = 1, \dots, N_E$ ,  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  y que es estrictamente convexa en  $[\underline{m}_j, \overline{m}_j]$ . Entonces, de la linealidad del sistema (3.47) se tiene que  $\tilde{J}_j$  es diferenciable y estrictamente convexa. Como además  $\tilde{M}_j$  es convexo, una condición necesaria y suficiente para que se verifique (4.3) es que

$$\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial \tilde{m}_j}(\tilde{m}^*)(\tilde{m}_j - \tilde{m}_j^*) \geq 0, \quad \forall \tilde{m}_j \in \tilde{M}_j, \quad (4.5)$$

donde  $\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial \tilde{m}_j}(\tilde{m}^*) = \left( \frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial m_j^1}(\tilde{m}^*) \mid \dots \mid \frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial m_j^N}(\tilde{m}^*) \right) \in M_{1 \times N}$ , y la expresión se entiende entonces como un producto matricial.

Igual que hicimos en la sección 3.1.3, trataremos ahora de obtener una expresión para  $\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial \tilde{m}_j}(\tilde{m})$  que nos permita dar una caracterización útil de los equilibrios de Nash del problema (4.2).

Denotando por  $\delta_j \tilde{m}_j = (\delta_j m_j^1, \dots, \delta_j m_j^N)^T \in \mathbb{R}^N$  una pequeña perturbación de  $\tilde{m}_j$ , tenemos que

$$\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial \tilde{m}_j}(\tilde{m}) \delta_j \tilde{m}_j = \Delta t \sum_{n=1}^N f'_j(m_j^n) \delta_j m_j^n + \sum_{l=n(j-1)+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\bar{A}_l} (\rho_h^{n+1} - \sigma_l)_+ \delta_j \rho_h^{n+1} dx \quad (4.6)$$

siendo  $\delta_j \rho_h^0 = 0 \in V_h$  y, para  $n = 0, \dots, N-1$ ,  $\delta_j \rho_h^{n+1} \in V_h$  solución de

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_h} \frac{\delta_j \rho_h^{n+1} - \delta_j \rho_h^n \circ X_h^n}{\Delta t} v_h + \beta \int_{\Omega_h} \nabla \delta_j \rho_h^{n+1} \nabla v_h + \kappa \int_{\Omega_h} \delta_j \rho_h^{n+1} v_h \\ = \frac{\delta_j m_j^{n+1}}{h^{n+1}(P_j)} v_h(P_j), \quad \forall v_h \in V_h. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Para introducir el problema adjunto discreto, para cada  $n = 0, \dots, N-1$ , consideramos  $p_{jh}^n \in V_h$ , sustituimos en la expresión anterior  $v_h$  por  $p_{jh}^n$  y hacemos el sumatorio en  $n$ . Teniendo en cuenta que  $\delta_j \rho_j^0 = 0$ , resulta

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\Omega_h} \delta_j \rho_h^{n+1} p_{jh}^n - \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=0}^{N-2} \int_{\Omega_h} (\delta_j \rho_h^{n+1} \circ X_h^{n+1}) p_{jh}^{n+1} + \beta \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\Omega_h} \nabla \delta_j \rho_h^{n+1} \nabla p_{jh}^n \\ + \kappa \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\Omega_h} \delta_j \rho_h^{n+1} p_{jh}^n = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\delta_j m_j^{n+1}}{h^{n+1}(P_j)} p_{jh}^n(P_j) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Nuestro objetivo es expresar  $\sum_{l=n(j-1)+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\bar{A}_l} (\rho_h^{n+1} - \sigma_l)_+ \delta_j \rho_h^{n+1} dx$  a partir de los estados adjuntos discretos  $p_{jh}^n$ . Con este objetivo en mente, consideramos el siguiente problema, que llamaremos *problema adjunto discreto*:

Dado  $p_{jh}^N = 0 \in V_h$ , para  $n = N-1, \dots, 0$ , calcular  $p_{jh}^n \in V_h$  verificando:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left( \int_{\Omega_h} p_{jh}^n v_j - \int_{\Omega_h} p_{jh}^{n+1} (v_h \circ X_h^{n+1}) \right) + \beta \int_{\Omega_h} \nabla p_{jh}^n \nabla v_h + \kappa \int_{\Omega_h} p_{jh}^n v_h \\ = \sum_{l=n(j-1)+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{\bar{A}_l} (\rho_h^{n+1} - \sigma_l)_+ v_h dx, \quad \forall v_h \in V_h. \end{aligned} \quad (4.9)$$

De este modo, para  $n = N - 1, \dots, 0$ ,  $p_{jh}^n$  denota la solución de este problema. Como (4.9) es válido  $\forall v_h \in V_h$ , en particular es válido para  $v_h = \delta_j \rho_h^{n+1}$ . Tomando entonces  $v_h = \delta_j \rho_h^{n+1}$  en (4.9) y haciendo el sumatorio en  $n$ , la expresión (4.8) nos lleva a que

$$\sum_{l=n(j-1)+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\bar{A}_l} (\rho_h^{n+1} - \sigma_l)_+ \delta_j \rho_h^{n+1} dx = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\delta_j m_j^{n+1}}{h^{n+1}(P_j)} p_{jh}^n(P_j)$$

Sustituyendo esta expresión en (4.6) y reordenando términos resulta que

$$\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial \tilde{m}_j}(\tilde{m}) \delta_j \tilde{m}_j = \Delta t \left( \sum_{n=1}^N \left( f'_j(m_j^n) + \frac{p_{jh}^{n-1}(P_j)}{h^n(P_j)} \right) \delta_j m_j^n \right), \quad (4.10)$$

o lo que es lo mismo, para  $j = 1, \dots, N_E$ , y para  $n = 1, \dots, N$ ,

$$\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial m_j^n}(\tilde{m}) = \Delta t \left( f'_j(m_j^n) + \frac{p_{jh}^{n-1}(P_j)}{h^n(P_j)} \right). \quad (4.11)$$

Finalmente, llevando la expresión (4.10) a la condición inicial de optimalidad (4.5) obtenemos el siguiente resultado:

**Teorema 12 (Condiciones de un Equilibrio de Nash: problema discreto)** *Sea  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \bar{m}_j])$  estrictamente convexa en  $[\underline{m}_j, \bar{m}_j]$  para todo  $j = 1, \dots, N_E$ . Entonces, el vector  $\tilde{m}^* \in \tilde{M}$  es un equilibrio de Nash del problema (4.2) si y sólo si, dados  $\rho_h^0 \in V_h$ ,  $p_{1h}^N = \dots = p_{N_E h}^N = 0 \in V_h$ , para  $j = 1, \dots, N_E$  y  $n = 0, \dots, N - 1$ , existen  $\rho_h^{n+1} \in V_h$  y  $p_{jh}^n \in V_h$  verificando*

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_h} \frac{\rho_h^{n+1} - \rho_h^n \circ X_h^n}{\Delta t} v_n + \beta \int_{\Omega_h} \nabla \rho_h^{n+1} \cdot \nabla v_h + \kappa \int_{\Omega_h} \rho_h^{n+1} v_h \\ = \sum_{j=1}^{N_E} \frac{m_j^{*n+1}}{h^{n+1}(P_j)} v_h(P_j), \quad \forall v_h \in V_h, \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left( \int_{\Omega_h} p_{jh}^n v_j - \int_{\Omega_h} p_{jh}^{n+1} (v_h \circ X_h^{n+1}) \right) + \beta \int_{\Omega_h} \nabla p_{jh}^n \nabla v_h + \kappa \int_{\Omega_h} p_{jh}^n v_h \\ = \sum_{l=n_{j-1}+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \int_{\bar{A}_l} (\rho_h^{n+1} - \sigma_l)_+ v_h dx, \quad \forall v_h \in V_h, \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\sum_{n=1}^N \left( f'_j(m_j^{*n}) + \frac{p_{jh}^{n-1}(P_j)}{h^n(P_j)} \right) (m_j^n - m_j^{*n}) \geq 0, \quad \forall \tilde{m} \in M. \quad (4.14)$$

### 4.2.3. Resolución numérica

De modo similar a como hicimos en el capítulo anterior, supondremos aquí que el mínimo de (4.3) se alcanza en el interior de  $\tilde{M}_j$ , con lo cual la condición (4.14) puede sustituirse por

$$f'_j(m_j^*) + \frac{p_{jh}^{n-1}(P_j)}{h^n(P_j)} = 0, \quad (4.15)$$

y describiremos, a continuación, un algoritmo numérico para obtener un equilibrio de Nash del problema (4.2) en esa situación.

### Notación matricial del sistema de optimalidad

Tomando ahora la base nodal de  $V_h$ ,  $B_{V_h} = \{\tilde{v}_1, \tilde{v}_2, \dots, \tilde{v}_{N_v}\}$ , el problema de estado discreto y el problema adjunto discreto pueden escribirse en forma matricial.

Por una parte, tal y como hemos visto anteriormente, el problema (3.47) es equivalente a:

Dado  $\hat{\rho}_h^0 = (\rho_h^0(x_1), \dots, \rho_h^0(x_{N_v}))^T$ , para  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , encontrar  $\hat{\rho}^{n+1} = (\rho_h^{n+1}(x_1), \dots, \rho_h^{n+1}(x_{N_v}))^T$  tal que satisfice

$$A_{1h}\hat{\rho}_h^{n+1} - B_{1h}^n\hat{\rho}_h^n = \sum_{j=1}^{N_E} \frac{m_j^{n+1}}{h^{n+1}(P_j)} b_{jh}, \quad (4.16)$$

donde, para  $i, k = 1, \dots, N_v$ :

- $(A_{1h})_{ik} = \left(\frac{1}{\Delta t} + k\right) \int_{\Omega_h} \tilde{v}_k \tilde{v}_i + \beta \int_{\Omega_h} \nabla \tilde{v}_k \nabla \tilde{v}_i$
- $(B_{1h}^n)_{ik} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_h} \tilde{v}_k(X_h^n(x)) \tilde{v}_i$
- $(b_{hj})_i = \tilde{v}_i(P_j)$

Por otra parte, es fácil verificar que el problema (4.9) es equivalente a:

Dado  $p_{jh}^N = (0, \dots, 0)^T$ , para  $n = N - 1, \dots, 0$ , y para  $j = 1, \dots, N_E$ , encontrar  $\hat{p}_{jh}^n = (p_{jh}^n(x_1), \dots, p_{jh}^n(x_{N_v}))^T$  tal que satisfice

$$A_{1h}\hat{p}_{jh}^n - (B_{1h}^{n+1})^T \hat{p}_{jh}^{n+1} = \beta_{jh}^n, \quad (4.17)$$

donde además, para  $i = 1, \dots, N_v$ :

$$\blacksquare (\beta_{jh}^n)_i = \sum_{m=n_{(j-1)}+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_m} \int_{\Omega_h} \chi_{\bar{A}_m} \left( \sum_{l=1}^{N_v} [(\hat{\rho}_h^{n+1})_l \tilde{v}_l - \sigma_m]_+ \right) \tilde{v}_i$$

De este modo, el cálculo de un equilibrio de Nash para el problema se puede formular matricialmente como:

Dados  $\hat{\rho}_h^0 = (\rho_{h0}(x_1), \rho_{h0}(x_2), \dots, \rho_{h0}(x_{N_v}))^T$  y  $\hat{p}_{jh}^N = (0, 0, \dots, 0)^T$ , para  $j = 1, \dots, N_E$ , y para  $n = 0, 1, \dots, N - 1$ , calcular  $m_j^{*n+1} \in \mathbb{R}$  (con  $\underline{m}_j < m_j^{*n+1} < \overline{m}_j$ ),  $\hat{\rho}_h^{n+1} \in \mathbb{R}^{N_v}$ ,  $\hat{p}_{jh}^n \in \mathbb{R}^{N_v}$  verificando:

$$A_{1h}\hat{\rho}_h^{n+1} - B_{1h}^n \hat{\rho}_h^n = \sum_{k=1}^{N_E} \frac{m_k^{*n+1}}{h^{n+1}(P_k)} b_{kh}, \quad (4.18)$$

$$A_{1h}\hat{p}_{jh}^n - (B_{1h}^{n+1})^T \hat{p}_{jh}^{n+1} = \beta_{jh}^n, \quad (4.19)$$

$$f'_j(m_j^{*n+1}) = -\frac{1}{h^{n+1}(P_j)} C_{jh} \hat{p}_{jh}^n, \quad (4.20)$$

siendo  $C_{jh}$  la matriz de orden  $1 \times N_v$  que extrae el valor  $p_{jh}^{n+1}(P_j)$  a partir del vector  $\hat{p}_{jh}^{n+1}$ .

**Nota 7** Es importante resaltar que el sistema conformado por (4.18)-(4.20) no es el mismo que el sistema conformado por (3.49)-(3.51). Las diferencias observables son las siguientes:

- las matrices del primer miembro de (4.18) no son las mismas que en (3.49),
- se presenta un desfase en tiempo entre (4.20) y (3.51),

lo que implica que los resultados obtenidos para los casos discreto y continuo no serán necesariamente iguales.

### Resolución del sistema discreto

Nuevamente, para resolver el sistema conformado por (4.18)-(4.20), lo analizamos como un sistema  $S_D(\tilde{m}^*) = 0$ , con  $S_D : \mathbb{R}^{NN_E} \rightarrow \mathbb{R}^{NN_E}$ , y lo resolvemos, teniendo en cuenta las restricciones  $\underline{m}_j < m_j^{*n} < \overline{m}_j$ ,  $j = 1, \dots, N_E$ ,  $n = 1, \dots, N$ , con un método de mínimos cuadrados estándar.

Para  $\tilde{m} \in \tilde{M}$  dado, el cálculo de  $S_D(\tilde{m})$  se efectúa a través del siguiente algoritmo:

#### Algoritmo 6: Evaluación de la función $S_D$

Datos iniciales:  $\rho_h^0 \in V_h$ ,  $\tilde{m}^* \in \tilde{M}$ .

- *Paso 1 (Resolución del sistema de estado):*

Tomando  $\tilde{m}^*$  dado, resolver (4.18) para  $n = 0, 1, \dots, N - 1$ .

- *Paso 2 (Resolución del problema adjunto discreto):*

Para  $j = 1, \dots, N_E$ , calcular  $\beta_{jh}^n$  a partir de la solución obtenida en el Paso 1 y resolver (4.19) para  $n = N - 1, \dots, 0$ .

- *Paso 3 (Evaluación de  $S_D(\tilde{m}^*)$ ):*

A partir del valor de  $\tilde{m}^*$  y de la solución obtenida en el Paso 2, construir, de acuerdo con (4.20),

$$S_D(\tilde{m}^*) = \left[ [f'_j(m_j^{*n+1}) + \frac{1}{h^{n+1}(P_j)} C_{jh} \hat{p}_{jh}^n]_{n=0}^{N-1} \right]_{j=1}^{N_E} \quad (4.21)$$

## 4.3. Estudio cooperativo: Soluciones de Pareto

### 4.3.1. Existencia de solución y condiciones de optimalidad

**Teorema 13** Sea  $f_j \in C([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  estrictamente convexa en  $[\underline{m}_j, \overline{m}_j]$  para todo  $j = 1, \dots, N_E$ . Entonces, para cada vector  $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_{N_E})^T \in \mathbb{R}^{N_E}$ ,  $\lambda \geq 0$ ,  $\lambda_k > 0$  para al menos un  $k \in \{1, \dots, N_E\}$ , existe una solución óptimo-Pareto para el problema (4.2).

**Demostración** A partir del Teorema 6 es suficiente comprobar que el problema de pesos

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Minimizar } \tilde{J}_P(\tilde{m}) = \sum_{j=1}^n \lambda_j \tilde{J}_j(\tilde{m}) \\ \text{sujeto a } \tilde{m} \in \tilde{M} \end{array} \right. \quad (4.22)$$

tiene solución única, lo cual es evidente, dado que  $\tilde{J}_j$  es continuo y estrictamente convexo para  $j = 1, \dots, N_E$ , y  $\tilde{M}$  es compacto.  $\square$

**Teorema 14** *Si, para cada  $j = 1, \dots, N_E$ ,  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$ , entonces el funcional  $\tilde{J}_j$  definido en (4.1) es diferenciable en cada punto  $\tilde{m} \in \tilde{M}$ , y su diferencial viene dada por*

$$\langle D\tilde{J}_j(\tilde{m}), \delta\tilde{m} \rangle = \Delta t \sum_{n=1}^N f'_j(m_j^n) \delta_j m_j^n + \sum_{k=1}^{N_E} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{p_{jh}^n(P_k)}{h^{n+1}(P_k)} \delta_k m_k^{n+1} \quad (4.23)$$

para todo  $\delta\tilde{m} = (\delta\tilde{m}_1, \dots, \delta\tilde{m}_{N_E}) \in \mathbb{R}^{NN_E}$ .

**Demostración** La diferenciability de cada funcional  $\tilde{J}_j$  se obtiene de la linealidad del sistema (3.47). Además, en la sección anterior ya dedujimos una expresión para  $\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial \tilde{m}_j}(\tilde{m})$ .

Procedemos ahora de modo completamente similar para calcular  $\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial \tilde{m}_k}(\tilde{m})$  cuando  $k \neq j$ .

Sea  $\delta_k \tilde{m}_k = (\delta_k m_k^1, \dots, \delta_k m_k^N)^T \in \mathbb{R}^N$  una pequeña perturbación de  $\tilde{m}_k$ , tenemos que

$$\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial \tilde{m}_k}(\tilde{m})(\delta \tilde{m}_k) = \sum_{l=n(j-1)+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\tilde{A}_l} (\rho_h^{n+1} - \sigma_l)_+ \delta_k \rho_h^{n+1} dx \quad (4.24)$$

donde, según la notación introducida anteriormente,  $\delta_k \rho_h^0 = 0 \in V_h$  y, para cada  $n = 0, \dots, N-1$ ,  $\delta_k \rho_h^{n+1} \in V_h$  es la solución de:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_h} \frac{\delta_k \rho_h^{n+1} - \delta_k \rho_h^n \circ X_h^n}{\Delta t} v_h + \beta \int_{\Omega_h} \nabla \delta_k \rho_h^{n+1} \nabla v_h + \kappa \int_{\Omega_h} \delta_k \rho_h^{n+1} v_h \\ = \frac{\delta_k m_k^{n+1}}{h^{n+1}(P_k)} v_h(P_k), \quad \forall v_h \in V_h. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Tomando en esta expresión  $v_h = p_{jh}^n$ , solución del problema adjunto discreto, y haciendo el sumatorio en  $n$  resulta que

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\Omega_h} \delta_k \rho_h^{n+1} p_{jh}^n - \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=0}^{N-2} \int_{\Omega_h} (\delta_k \rho_h^{n+1} \circ X_h^n) p_{jh}^{n+1} + \beta \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\Omega_h} \nabla \delta_k \rho_h^{n+1} \nabla p_{jh}^n \\ + \kappa \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\Omega_h} \delta_k \rho_h^{n+1} p_{jh}^n = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\delta_k m_k^{n+1}}{h^{n+1}(P_k)} p_{jh}^n(P_k) \end{aligned} \quad (4.26)$$

De este modo, si en (4.9) tomamos  $v_h = \delta_k \rho_h^{n+1}$  y hacemos el sumatorio en  $n$  obtenemos

$$\sum_{l=n(j-1)+1}^{n_j} \frac{1}{\epsilon_l} \sum_{n=0}^{N-1} \int_{\tilde{A}_l} (\rho_h^{n+1} - \sigma_l)_+ \delta_k \rho_h^{n+1} dx = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\delta_k m_k^{n+1}}{h^{n+1}(P_k)} p_{jh}^n(P_k)$$

Llevando esta expresión a (4.24) tenemos que, para  $k \neq j$

$$\frac{\partial \tilde{J}_j}{\partial \tilde{m}_k}(\tilde{m})(\delta \tilde{m}_k) = \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\delta_k m_k^{n+1}}{h^{n+1}(P_k)} p_{jh}^n(P_k) \quad (4.27)$$

Las expresiones (4.10) y (4.27) nos proporcionan directamente la fórmula (4.23).  $\square$

Todo lo anterior nos sugiere el siguiente resultado:

**Teorema 15 (Condiciones de una solución óptimo-Pareto: problema discreto)**  
*Supongamos que  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  es estrictamente convexa en  $[\underline{m}_j, \overline{m}_j]$  para todo  $j = 1, \dots, N_E$ . Entonces, el vector  $\tilde{m}^* = (\tilde{m}_1^*, \tilde{m}_2^*, \dots, \tilde{m}_{N_E}^*) \in \tilde{M}$  es un óptimo-Pareto del problema (4.2) si y solamente si, dados  $\rho_h^0 \in V_h$ ,  $p_{1h}^N = \dots = p_{N_E h}^N = 0 \in V_h$ , existen:*

1.  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N_E})^T$ ,  $\lambda \geq 0$ ,  $\sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j = 1$ ,
2.  $\rho_h^{n+1} \in V_h$ ,  $n = 0, \dots, N-1$ ,
3.  $p_{jh}^n \in V_h$ ,  $n = 0, \dots, N-1$ ,

tales que  $\rho_h^{n+1} \in V_h$  satisface el problema de estado discreto (4.12),  $p_{jh}^n \in V_h$  satisface el problema adjunto discreto (4.13) para  $j = 1, 2, \dots, N_E$ , y se verifica la siguiente condición de optimalidad:

$$\sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j \left[ \sum_{n=1}^N f_j'(m_j^n)(m_j^n - m_j^{*n}) + \sum_{k=1}^{N_E} \left( \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{h^{n+1}(P_k)} p_{jh}^n(P_k) \right) (m_j^{n+1} - m_j^{*n+1}) \right] \geq 0, \quad \forall \tilde{m} \in \tilde{M}. \quad (4.28)$$

**Demostración** En primer lugar, si  $\tilde{m}^*$  es solución del problema de pesos, entonces

$$\langle D\tilde{J}_P(\tilde{m}^*)(\tilde{m} - \tilde{m}^*) \rangle \geq 0, \quad \forall \tilde{m} \in \tilde{M}, \quad (4.29)$$

y de la expresión (4.23) se deriva la condición de optimalidad (4.28), donde  $p_{jh}^n \in V_h$ , es solución de (4.13) y, a su vez,  $\rho_h^{n+1}$  es solución de (4.12).

Recíprocamente, de la existencia de  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N_E})^T$ ,  $\lambda \geq 0$ ,  $\lambda_j > 0$  para algún  $j \in \{1, 2, \dots, N_E\}$ , y de las funciones  $\rho_h^{n+1}$  y  $p_h^{n+1}$  verificando (4.12), (4.13) y (4.28), se llega a (4.29) y, consecuentemente,  $\tilde{m}^*$  es solución del problema (4.22). Finalmente, como el problema (4.22) tiene una única solución (ver la demostración del Teorema 13), del Teorema 6 concluimos que  $\tilde{m}^*$  es un óptimo-Pareto del problema (4.2).  $\square$

### 4.3.2. Resolución numérica

El algoritmo numérico para generar los óptimo-Pareto del problema discretizado (4.2) es completamente similar al descrito en la sección 3.2.4 para el problema continuo. Recordemos brevemente los pasos a seguir.

El conjunto de óptimos-Pareto del problema (4.2) viene dado por:

$$\mathcal{P}_D^* = \bigcup_{\substack{\lambda \in \mathbb{R}^{N_E} \\ \lambda \geq 0 \\ \sum_{j=1}^{N_E} \lambda_j = 1}} \{\tilde{m}^* \in \tilde{M} : \tilde{m}^* \text{ es la única solución del problema (4.22)}\} \quad (4.30)$$

Para la obtención de este conjunto, realizamos las siguientes fases:

**Fase 1:** Generar un número suficiente ( $imax$ ) de vectores de pesos  $\{\lambda^1, \dots, \lambda^{imax}\} \subset \mathbb{R}^{N_E}$  de acuerdo al método detallado en el Algoritmo 2 de la sección 3.2.4.

**Fase 2:** Para cada  $i = 1, \dots, imax$  resolvemos el problema de pesos discreto (4.22) tomando  $\lambda = \lambda^i$ , y utilizando el método de gradiente espectral proyectado (SPG), descrito en el Algoritmo 3 de la sección 3.2.4.

Para cada  $\tilde{m} \in \tilde{M}$ , el cálculo de  $\tilde{J}_P(\tilde{m})$ , se hace siguiendo el Algoritmo 4 de la mencionada sección ( $\tilde{J}_P(\tilde{m}) = J_P(m^{\Delta t})$ ). En cambio, para el cálculo de  $\nabla \tilde{J}_P(\tilde{m})$  se emplea el siguiente algoritmo:

#### Algoritmo 7: Cálculo de $\nabla \tilde{J}_P(\tilde{m})$

Datos iniciales:  $\tilde{m} \in \tilde{M}$  y, para  $n = 0, 1, \dots, N$ ,  $\rho_h^n \in V_h$ , solución del problema (4.12).

- *Paso 1:* Para  $j = 1, \dots, N_E$ , tomar  $p_{jh}^N = 0 \in V_h$  y resolver el sistema resolver el sistema (4.13), para  $n = N - 1, \dots, 0$ .

- *Paso 2:* Para  $n = 1, \dots, N$ , y para  $j = 1, 2, \dots, N_E$ , calcular

$$\partial_{j^n} \tilde{J}_P(\tilde{m}) = \lambda_j f'(m_j^n) + \sum_{k=1}^{N_E} \lambda_k \frac{1}{h^n(P_k)} p_{jh}^{n-1}(P_k)$$

- *Paso 3:* Conformar

$$\nabla \tilde{J}_P(\tilde{m}) = \left[ [\partial_{j^n} \tilde{J}_P(\tilde{m})]_{n=1}^N \right]_{j=1}^{N_E}.$$

#### 4.4. Resultados Numéricos: Comparaciones

El objetivo es ahora comparar los resultados numéricos obtenidos al resolver el Problema I *continuo* (1.7) con los resultados obtenidos para el Problema I *discreto* (4.2), tanto para un punto de vista no cooperativo (Equilibrio de Nash) como para un punto de vista cooperativo (Optimalidad de Pareto).

Para esto, hemos resuelto (4.2) en la ría de Vigo con las condiciones dadas en la Sección 3.3 y a continuación presentamos las figuras que consideramos más relevantes para la comparación de resultados.

En las Figuras 4.1 y 4.2 mostramos la comparación entre los vertidos correspondientes a un Equilibrio de Nash para el problema *continuo* (subfiguras (a)) y para el problema *discreto* (subfiguras (b)). En ambos casos podemos observar un comportamiento bastante similar, a excepción de lo que ocurre en los últimos instantes de la simulación, donde se observa que los vertidos para el problema discreto no alcanzan los máximos obtenidos para el problema continuo. Esto se debe, presumimos, al desfase en tiempo que se observa en la expresión del *Paso 3* del Algoritmo 6, con respecto a su similar *Paso 3* del Algoritmo 1.

Por otra parte, dado que la formulación del problema adjunto es la misma para ambos enfoques (cooperativo y no cooperativo), podemos esperar que en el caso de la optimalidad de Pareto se presente un comportamiento similar y observemos un desfase en tiempo para el caso discreto. En efecto, esto se presenta claramente en la Figura 4.3 donde nuevamente la solución óptimo-Pareto del problema discreto no alcanza los valores máximos logrados en la solución óptimo-Pareto del problema continuo.

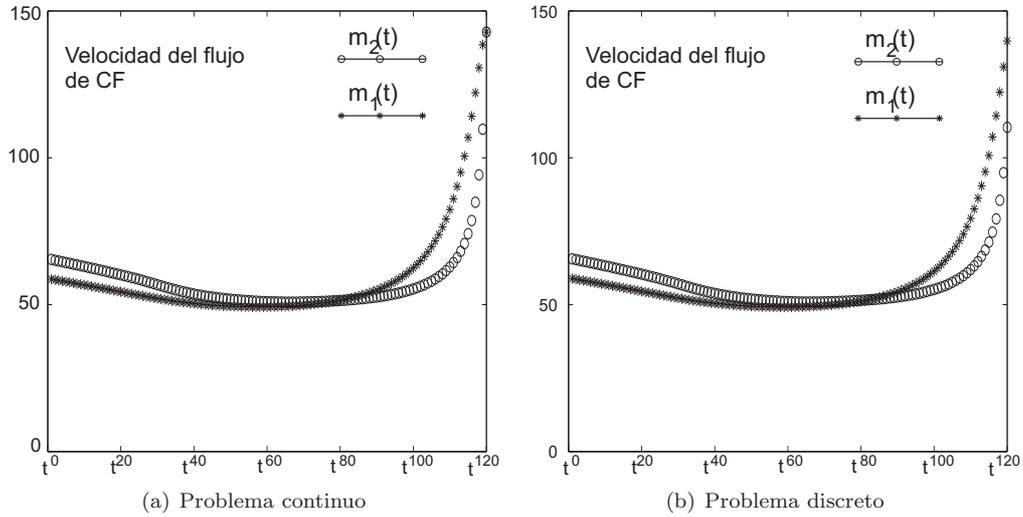


Figura 4.1: Vertidos correspondientes a un Equilibrio de Nash considerando  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-3}$

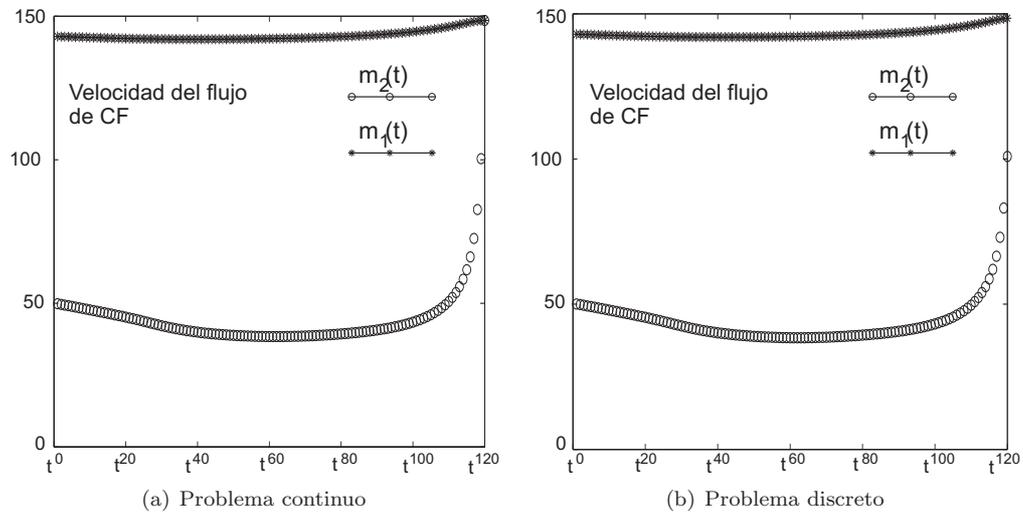


Figura 4.2: Vertidos correspondientes a un Equilibrio de Nash considerando  $\epsilon_1 = 1, \epsilon_2 = 10^{-3}$

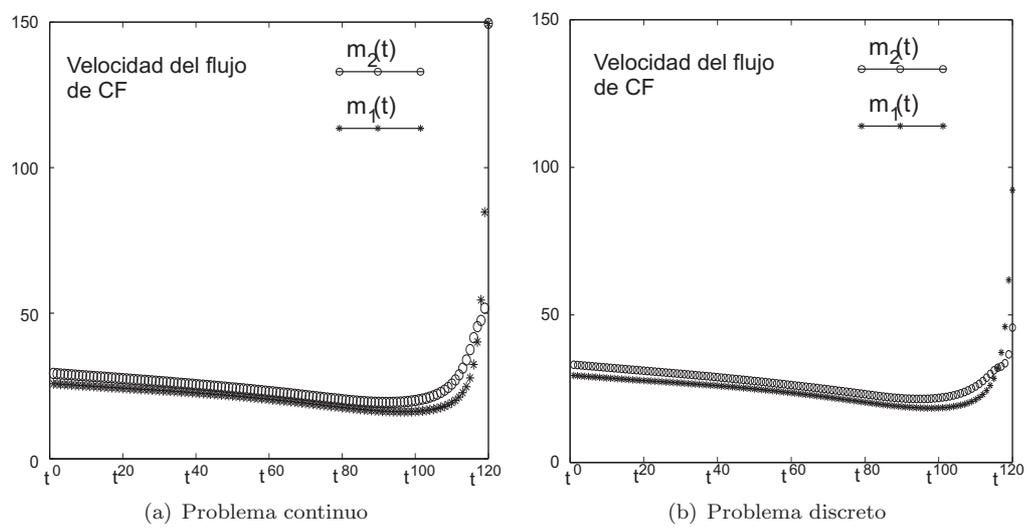


Figura 4.3: Vertidos correspondientes a una solución óptimo-Pareto asociada a los pesos  $\lambda^5 = (0.5, 0.5)$



## Capítulo 5

### Problema II

Como ya comentamos en la Introducción, cuando es un único organismo (por ejemplo, una comunidad autónoma o un municipio) el que gestiona todas las plantas depuradoras, el problema de la gestión óptima del sistema de depuración debe enfocarse de manera completamente distinta a cuando cada planta esta gestionada por un organismo diferente. Cuando hay un único gestor, sólo tiene cabida un estudio cooperativo del problema. Además, si bien el coste puramente económico (lo que se invierte en el proceso de depuración) parece que puede optimizarse de forma global (sumando los costes de todas las plantas), el coste ecológico (el que está en función de la contaminación) debe separarse por zona, puesto que situaciones con costes globales iguales pueden no ser igual de buenas para el gestor. De este modo, el objeto de este capítulo es estudiar, bajo una óptica cooperativa, el Problema II - dado por (1.10) - que, recordamos, se formulaba como:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } K(m) = (K_C(m), K_1(m) \dots, K_{N_Z}(m))^T \\ \text{sujeto a } m \in M, \end{cases}$$

donde, para  $m = (m_1, \dots, m_{N_E}) \in M$ ,

$$K_C(m) = \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T f_j(m_j(t)) dt,$$

$$K_i(m) = \frac{1}{2\epsilon_i} \int_{\bar{A}_i \times [0, T]} (\rho(x, t) - \sigma_i)_+^2 dx dt, \quad i = 1, \dots, N_Z.$$

## 5.1. Una solución ecológicamente óptima

Una solución ecológicamente óptima para este problema, será aquella que, con el menor gasto posible en depuración, mantenga concentraciones de CF inferiores o iguales a la cota máxima fijada en cada una de las zonas, es decir, satisfaga las restricciones

$$\rho|_{\bar{A}_i \times [0, T]} \leq \sigma_i, \quad i = 1, \dots, N_Z.$$

Así, decimos que  $m \in M$  es una *solución ecológicamente óptima* del Problema II si es solución del siguiente problema de control óptimo mono-objetivo y con restricciones puntuales sobre el estado:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Minimizar} \quad K_C(m) \\ \text{sujeto a} \quad m \in M, \\ \quad \quad \quad \rho(m)|_{\bar{A}_i \times [0, T]} \leq \sigma_i, \quad i = 1, \dots, N_Z. \end{array} \right. \quad (5.1)$$

Debemos remarcar aquí que el problema (5.1) ya fue planteado y estudiado en [79], donde se demostró la existencia y unicidad de su solución. Este hecho nos garantiza que el Problema II admite una única solución ecológicamente óptima.

En este trabajo estudiaremos todas las soluciones óptimo-Pareto del Problema II, caracterizándolas y obteniéndolas - como ya hicimos para el Problema I - a partir del método de pesos. Observaremos como este método, si bien no nos permite calcular exactamente la solución ecológicamente óptima, sí nos permite obtener una aproximación de esta tan buena como deseemos. Además, la obtención del frente Pareto supone presentar al gestor del sistema (*decision maker*) una batería de soluciones entre las que, por ejemplo, para un gasto de depuración fijo, pueda escoger aquella que más favorezca a una u otra zona de especial interés para el gestor.

## 5.2. Soluciones de Pareto

### 5.2.1. Existencia de solución

**Teorema 16** Si  $f_j \in C([\underline{m}_j, \bar{m}_j])$  es estrictamente convexa para todo  $j = 1, \dots, N_E$ , entonces, para cada vector  $\lambda = (\lambda_C, \lambda_1, \dots, \lambda_{N_Z})^T \in \mathbb{R}^{N_Z+1}$  verificando  $\lambda_C > 0$  y  $\lambda_i \geq 0$ ,  $i = 1, \dots, N_Z$ , existe una solución óptimo-Pareto del Problema II.

**Demostración** De acuerdo con los resultados del Teorema 6, basta con demostrar que el problema de pesos

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Minimizar } K_P(m) = \lambda_C K_C(m) + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i K_i(m) \\ \text{sujeto a } m \in M, \end{array} \right. \quad (5.2)$$

tiene solución única.

De las hipótesis del Teorema se tiene (ver Teorema 2) que los funcionales  $K_C, K_1, \dots, K_{N_Z}$  son continuos y convexos y, además,  $K_C$  es estrictamente convexo. De este modo, el funcional  $K_P(m)$  es continuo y convexo y, razonando como en la demostración del Teorema 8, se llega a que (5.2) tiene al menos una solución. La unicidad de la solución es, de nuevo, consecuencia de la convexidad estricta de  $K_P(m)$ , dado que  $\lambda_C > 0$ .  $\square$

### 5.2.2. Condiciones de optimalidad

Con el fin de obtener la caracterización de las soluciones óptimo-Pareto del Problema II, introducimos los siguientes *problemas adjuntos* para  $i = 1, \dots, N_Z$ :

$$\left. \begin{array}{l} -\frac{\partial r_i}{\partial t} - \beta \Delta r_i - \operatorname{div}(r_i \vec{u}) + \kappa r_i = \frac{1}{\epsilon_i} \chi_{\bar{A}_i} (\rho - \sigma_i)_+ \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \\ r_i(x, T) = 0 \quad \text{en } \Omega, \\ \beta \frac{\partial r_i}{\partial n} + r_i(\vec{u} \cdot \vec{n}) = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T), \end{array} \right\} \quad (5.3)$$

donde  $\chi_{\bar{A}_i}$  denota la función característica del conjunto  $\bar{A}_i$ .

**Definición 14** Decimos que  $r_i \in L^2(0, T; H^1(\Omega)) \cap C([0, T]; L^2(\Omega))$  es una solución de (5.3) si  $q_i(x, T) = 0$  c.p.d. en  $\Omega$  y se verifica que

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dt} \int_{\Omega} r_i(x, t) v(x) dx + \beta \int_{\Omega} \nabla r_i(x, t) \cdot \nabla v(x) dx + \int_{\Omega} r_i(x, t) \vec{u} \cdot \nabla v(x) dx + \\ \int_{\Omega} \kappa r_i(x, t) v(x) dx = \frac{1}{\epsilon_i} \int_{\Omega} \chi_{\bar{A}_i}(x) (\rho(x, t) - \sigma_i)_+ v(x) dx, \quad \forall v \in H^1(\Omega) \end{aligned} \quad (5.4)$$

en el sentido de las distribuciones  $\mathcal{D}'(0, T)$ .

Utilizando otra vez la Sección 9 del Capítulo IV de [49], tenemos el siguiente resultado de existencia y unicidad:

**Teorema 17** *Para cada  $i = 1, \dots, N_Z$ , el problema adjunto (5.3) tiene una solución única  $r_i \in L^2(0, T; H^2(\Omega)) \cap H^1(0, T; L^2(\Omega))$ .*

Por otra parte, también podemos demostrar los siguientes resultados:

**Teorema 18** *Si  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  para todo  $j = 1, \dots, N_E$ , entonces el funcional  $K_C(m)$  dado por (1.8), y los funcionales  $K_i(m)$  dados por (1.9), para  $i = 1, \dots, N_Z$ , son Gâteaux diferenciables en cada punto  $m = (m_1, \dots, m_{N_E}) \in M$  y, además,*

$$\langle DK_C(m), \delta m \rangle = \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T f'_j(m_j) \delta_j m_j dt \quad (5.5)$$

$$\langle DK_i(m), \delta m \rangle = \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_j, t)} r_i(P_j, t) \delta_j m_j dt \quad (5.6)$$

para todo  $\delta m = (\delta_1 m_1, \dots, \delta_{N_E} m_{N_E}) \in (L(0, T))^{N_E}$  satisfaciendo  $m + \epsilon \delta m \in M$ ,  $\epsilon > 0$ .

**Demostración** Dado que  $f_j \in C^1[\underline{m}_j, \overline{m}_j]$ , del Lema 1 se tiene que

$$\langle DK_C(m), \delta m \rangle = \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T f'_j(m_j) \delta_j m_j dt.$$

Por otra parte (ver Teorema 2),  $K_i$  es Gâteaux diferenciable y

$$\langle DK_i(m), \delta m \rangle = \frac{1}{\epsilon_i} \int_{\overline{A}_i \times [0, T]} (\rho - \sigma_i)_+ \delta \rho dx dt, \quad (5.7)$$

donde  $\delta \rho$  es la solución del problema linealizado (3.76).

Entonces, siguiendo los mismos pasos que en la demostración del Teorema 9, se llega a

$$\frac{1}{\epsilon_i} \int_{\overline{A}_i \times [0, T]} (\rho - \sigma_i)_+ \delta \rho dx dt = \sum_{k=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_k, t)} r_i(P_k, t) \delta_k m_k dt,$$

donde  $r_i$  es la solución del problema adjunto (5.3) y, por lo tanto, obtenemos

$$\langle DK_i(m), \delta m \rangle = \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_j, t)} r_i(P_j, t) \delta_j m_j dt,$$

como era nuestro objetivo. □

**Teorema 19 (Condiciones de optimalidad)** *Supongamos que  $f_j \in C^1([\underline{m}_j, \overline{m}_j])$  es estrictamente convexa para todo  $j = 1, \dots, N_E$ . Si  $m^* = (m_1^*, m_2^*, \dots, m_{N_E}^*) \in M$  es una solución óptimo-Pareto del problema (1.10), entonces existen:*

1.  $\lambda = (\lambda_C, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N_Z}) \in \mathbb{R}^{N_Z+1}$ ,  $\lambda \geq 0$ ,  $\lambda_C + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i = 1$ ,
2.  $\rho \in L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega)) \cap L^2(0, T; L^2(\Omega))$  para todo  $r, s \in [1, 2)$  con  $\frac{2}{r} + \frac{2}{s} > 3$ ,
3.  $r_1, r_2, \dots, r_{N_Z} \in C([0, T]; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega))$ ,

tales que  $\rho$  satisface el sistema de estado (3.22)-(3.24),  $r_i$  satisface el sistema adjunto (5.3) para todo  $i = 1, 2, \dots, N_Z$ , y se verifica la siguiente condición de optimalidad para todo  $m \in M$ :

$$\lambda_C \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T f'_j(m_j^*)(m_j - m_j^*) dt + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i \left( \sum_{j=1}^{N_E} \int_0^T \frac{1}{h(P_j, t)} r_i(P_j, t) (m_j - m_j^*) dt \right) \geq 0. \quad (5.8)$$

Recíprocamente, si existen

1.  $\lambda = (\lambda_C, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N_Z}) \in \mathbb{R}^{N_Z+1}$ ,  $\lambda \geq 0$ ,  $\lambda_C > 0$ ,  $\lambda_C + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i = 1$ ,
2.  $\rho \in L^r(0, T; W^{1,s}(\Omega)) \cap L^2(0, T; L^2(\Omega))$  para todo  $r, s \in [1, 2)$  con  $\frac{2}{r} + \frac{2}{s} > 3$ ,
3.  $r_1, r_2, \dots, r_{N_Z} \in C([0, T]; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega))$ ,

tales que  $\rho$  satisface el sistema de estado (3.22)-(3.24),  $r_i$  satisface el sistema adjunto (5.3) para todo  $i = 1, 2, \dots, N_Z$ , y se verifica la condición de optimalidad (5.8) para todo  $m \in M$ , entonces el punto  $m^* = (m_1^*, \dots, m_{N_E}^*) \in M$  es una solución óptimo-Pareto del problema (1.10).

**Demostración** Por los resultados del Teorema 7, si  $m^* \in M$  es una solución óptimo-Pareto del problema (1.10), existen  $\lambda = (\lambda_C, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N_Z})^T \in \mathbb{R}^{N_Z+1}$ ,  $\lambda \geq 0$ ,  $\lambda_C + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i = 1$ , tales que  $m^*$  es una solución del problema (5.2). Entonces, ya que  $M$  es convexa y  $K_C$  y  $K_i$  son Gâteaux diferenciables, tendremos:

$$\begin{aligned} \langle DK_P(m^*), (m - m^*) \rangle &= \lambda_C \langle DK_C(m), (m - m^*) \rangle \\ &+ \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i \langle DK_i(m^*), (m - m^*) \rangle \geq 0, \quad \forall m \in M. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Así pues, a partir de las expresiones (5.5) y (5.6), y considerando los Teoremas 1 y 17, obtenemos la existencia de las funciones  $\rho$  y  $r_1, \dots, r_{N_Z}$  que verifican (3.22)-(3.24), (5.3) y (5.8).

Conversamente, de la existencia de un multiplicador  $\lambda \in \mathbb{R}^{N_Z+1}$ , con  $\lambda_C > 0$ ,  $\lambda_i \geq 0$ ,  $\lambda_C + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i = 1$ , y las funciones  $\rho$  y  $r_1, \dots, r_{N_Z}$  verificando (3.22)-(3.24), (5.3) y (5.8), obtenemos (5.9) y, consecuentemente,  $m^* \in M$  es una solución del problema (5.2). Por último, dado que  $\lambda_C > 0$ , la solución del problema (5.2) es única, y del Teorema 6 concluimos que  $m^*$  es una solución óptimo-Pareto del Problema II  $\square$

### 5.2.3. Resolución numérica

Nuevamente el objetivo es proponer un algoritmo numérico para obtener el conjunto  $\mathcal{P}_{II}^*$  de soluciones óptimo-Pareto del Problema II. En este caso sólo sabemos que, si definimos

$$\begin{aligned} \underline{\mathcal{P}}_{II}^* = & \bigcup_{\substack{\lambda \in \mathbb{R}^{N_Z+1} \\ \lambda_C > 0 \\ \lambda \geq 0 \\ \lambda_C + \sum_{j=1}^{N_Z} \lambda_j = 1}} \{m^* \in M : m^* \text{ solución única del problema (5.2)}\} \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{P}}_{II}^* = & \bigcup_{\substack{\lambda \in \mathbb{R}^{N_Z+1} \\ \lambda \geq 0 \\ \lambda_C + \sum_{j=1}^{N_Z} \lambda_j = 1}} \{m^* \in M : m^* \text{ solución única del problema (5.2)}\} \end{aligned} \quad (5.11)$$

resulta que  $\underline{\mathcal{P}}_{II}^* \subset \mathcal{P}_{II}^* \subset \overline{\mathcal{P}}_{II}^*$ . Es más, parece razonable la conjetura de que, si  $m_{ecol} \in M$  es la solución de (5.1) - esto es, la solución ecológicamente óptima del Problema II -

entonces  $\mathcal{P}_{\mathcal{II}}^* = \underline{\mathcal{P}_{\mathcal{II}}^*} \cup \{m_{ecol}\}$ . Procediendo de modo similar a como se hizo en el Capítulo 3, identificaremos ahora el conjunto  $\underline{\mathcal{P}_{\mathcal{II}}^*}$  en dos fases:

**Fase 1:** Generar un número suficiente ( $imax$ ) de vectores de pesos  $\{\lambda^1, \dots, \lambda^{imax}\} \subset \mathbb{R}^{N_Z+1}$  verificando  $\lambda^i = (\lambda_C^i, \lambda_1^i, \dots, \lambda_{N_Z}^i) \geq 0$ ,  $\lambda_C^i > 0$ ,  $\lambda_C^i + \sum_{k=1}^{N_Z} \lambda_k^i = 1$ , para  $i = 1, \dots, imax$ . Para hacer esto utilizamos el Algoritmo 2, eliminando aquellos pesos con  $\lambda_C^i = 0$ .

**Fase 2:** Para cada  $i = 1, \dots, imax$ , tenemos que resolver el problema (5.2) tomando  $\lambda = \lambda^i$ . Para ello, elegimos un entero  $N \in \mathbb{N}$ , calculamos un paso de tiempo  $\Delta t = \frac{T}{N}$ , y definimos los pasos de tiempo discretos  $t^n = n\Delta t$  para  $n = 0, 1, \dots, N$ . Entonces, el problema (5.2) se aproxima por el siguiente problema discreto:

$$\begin{cases} \text{Minimizar } K_P(m^{\Delta t}) = \lambda_C K_C(m^{\Delta t}) + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i K_i(m^{\Delta t}) \\ \text{sujeto a } m^{\Delta t} \in M^{\Delta t}, \end{cases} \quad (5.12)$$

donde  $M^{\Delta t} = \prod_{j=1}^{N_E} M_j^{\Delta t}$ , siendo

$$M_j^{\Delta t} = \left\{ m_j^{\Delta t} \in M_j : m_j^{\Delta t} \Big|_{(t^{n-1}, t^n]} \in P_0, n = 1, 2, \dots, N \right\}.$$

El problema (5.2) se resuelve utilizando el método SPG (ver Algoritmo 3), que como ya se ha comentado, la única dificultad que presenta es el cálculo de  $K_P(m^{\Delta t})$  y su gradiente  $\nabla K_P(m^{\Delta t})$ , que pasa por resolver los sistemas de estado y adjunto, respectivamente.

### Cálculo de $K_P(m^{\Delta t})$ : Resolución del sistema de estado (1.3)

Para un  $m^{\Delta t} \in M^{\Delta t}$ , el cálculo de  $K_P(m^{\Delta t})$  necesita resolver el sistema (1.3) y obtener una aproximación de  $\rho(m^{\Delta t}, \rho_0)(\cdot, t^n)$ . Con el objetivo de hacerlo, resolvemos el sistema de estado discreto (3.47), obteniendo el valor  $\rho_h^n \in V_h$ ,  $n = 0, 1, \dots, N$ , y posteriormente calculamos  $K_P(m^{\Delta t})$ . En esquema, lo anterior se puede esquematizar como:

#### Algoritmo 8: Cálculo de $K_P(m^{\Delta t})$

Datos iniciales:  $\rho_h^0 \in V_h$ ,  $m^{\Delta t} \in M^{\Delta t}$ .

- *Paso 1:* Para  $n = 0, 1, \dots, N - 1$ , resolver el sistema discreto (3.47) obteniendo  $\rho_h^n \in V_h$ .

- *Paso 2:* Calcular

$$K(m^{\Delta t}) = \Delta t \left( \lambda_C \sum_{j=1}^{N_E} \sum_{n=1}^N f_j(m_j^n) + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i \frac{1}{2\epsilon_i} \sum_{n=1}^N \int_{\bar{A}_i} (\rho_h^n - \sigma_i)_+^2 dx \right).$$

### Cálculo de $\nabla K_P(m^{\Delta t})$ : Resolución del problema adjunto (5.3)

Una vez hemos calculado, para  $n = 1, \dots, N$ ,  $\rho_h^n \in V_h$  solución de (3.47), es posible obtener las aproximaciones totalmente discretizadas de los sistemas adjuntos (5.3) para  $i = 1, \dots, N_Z$ :

Dados  $r_{ih}^N = 0 \in V_h$ , encontrar  $r_{ih}^n \in V_h$ , para  $n = N-1, \dots, 0$ , satisfaciendo:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_h} \frac{r_{ih}^n - r_{ih}^{n+1} \circ Y_h^{n+1}}{\Delta t} v_h + \int_{\Omega_h} r_{ih}^n \bar{u}^n \cdot \nabla v_h + \int_{\Omega_h} \bar{u}^n \cdot (\nabla r_{ih}^n) v_h \\ & + \beta \int_{\Omega_h} \nabla r_{ih}^n \cdot \nabla v_h + \kappa \int_{\Omega_h} r_{ih}^n v_h = \frac{1}{\epsilon_i} \int_{\Omega_h} \chi_{\bar{A}_i} (\rho_h^n - \sigma_i)_+ v_h, \quad \forall v_h \in V_h, \end{aligned} \quad (5.13)$$

El cálculo de  $\nabla K_P(m^{\Delta t})$  se hace ahora a partir de las funciones  $r_{ih}^n \in V_h$ ,  $n = 0, 1, \dots, N$ ,  $i = 1, \dots, N_Z$ . En esquema, podemos escribirlo de la siguiente manera:

#### Algoritmo 9: Cálculo de $\nabla K_P(m^{\Delta t})$

Datos iniciales:  $m^{\Delta t} \in M^{\Delta t}$  y, para  $n = 0, 1, \dots, N$ ,  $\rho_h^n \in V_h$ , aproximación de  $\rho(m^{\Delta t}, \rho_h^0)(\cdot, t^n)$ .

- *Paso 1:* Para  $i = 1, \dots, N_Z$ , resolver el sistema (5.13).

- *Paso 2:* Para  $n = 1, \dots, N$ , y para  $j = 1, \dots, N_E$ , calcular

$$\partial_{jn} K_P(m^{\Delta t}) = \lambda_C \partial_{jn} K_C(m^{\Delta t}) + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i \partial_{jn} K_i(m^{\Delta t}) = \lambda_C f_j'(m_j^n) + \sum_{i=1}^{N_Z} \lambda_i \left( \frac{1}{h^n(P_j)} r_{ih}^n(P_j) \right)$$

- *Paso 3:* Conformar  $\nabla K_P(m^{\Delta t}) = (\nabla_1 K_P(m^{\Delta t}), \dots, \nabla_{N_E} K_P(m^{\Delta t})) \in L^{\Delta t}$  dado por

$$\nabla_j K_P(m^{\Delta t})|_{[t^{n-1}, t^n]} = \partial_{jn} K_P(m^{\Delta t}).$$

### 5.3. Resultados Numéricos

Presentamos ahora los resultados numéricos obtenidos al resolver el Problema II en el mismo dominio y bajo las mismas circunstancias en las que se resolvió el Problema I, y que ya fueron descritas con detalle al principio de la sección 3.3. Cabe destacar únicamente que, si bien no se han alterado ni el número de plantas ( $N_E = 2$ ), ni la ubicación de los puntos de vertido, ni la ubicación de las zonas a proteger (ver figura 3.1(b)), si se han realizado experimentos considerando una única zona a proteger ( $\bar{A}_1$ ) y experimentos con las dos zonas ( $\bar{A}_1$  y  $\bar{A}_2$ ).

#### Experimento I: Una única zona a proteger

Consideramos que en el dominio  $\Omega_h$  se pretende proteger sólo la zona  $\bar{A}_1$ , en la que se tiene como umbral máximo de CF  $\sigma_1 = 0.000348$  y se fija una penalización por depuración insuficiente de  $\epsilon_1 = 10^{-6}$ .

En la tabla 5.1 mostramos los valores de los funcionales objetivo  $K_C$  y  $K_1$  evaluados en las soluciones óptimo-Pareto correspondientes a los pesos generados por el algoritmo 2 con  $N_P = 10$ . En la figura 5.1 se pinta el frente Pareto correspondiente a esa tabla y en las figuras 5.2-5.4 se muestran los óptimos-Pareto correspondientes a los pesos  $\lambda^1 = (0.9, 0.1)$ ,  $\lambda^5 = (0.5, 0.5)$  y  $\lambda^9 = (0.1, 0.9)$ , junto con las concentraciones de CF (en un área cercana a la zona a proteger y en el último instante de la simulación) a las que dan lugar esos vértidos.

Se observa claramente que al restar importancia al factor económico en favor del factor ecológico (bajar  $\lambda_C$  y subir  $\lambda_1$ ) la depuración aumenta en las dos plantas y, en consecuencia, la concentración de CF la zona  $\bar{A}_1$  disminuye. En el caso extremo  $\lambda^{10} = (0, 1)$  los costes del proceso de depuración en ambas plantas (valores (a) y (b) en la tabla 5.1) son  $\int_0^T f_j(1)dt$ . Esto obedece al hecho de que, si no importa el coste económico, una solución óptima es depurar al máximo, es decir, verter lo mínimo posible (así, la solución que se obtiene del problema (5.2) es la que viene dada por  $m_j^{\Delta t} \equiv \underline{m}_j = 1$ , que se corresponde con una penalización nula ( $K_1(m^{\Delta t}) = 0$ ). Aún así, como ya hemos comentado, esta solución -a pesar de ser ecológicamente óptima- es tan sólo una de tantas soluciones del problema (5.2), -cabe recordar que si  $\lambda_C = 0$  entonces  $K_P(m^{\Delta t})$  deja de ser estrictamente convexo- y puede no ser (de hecho no lo es), un óptimo-Pareto.

Para encontrar la solución ecológicamente óptima con el menor gasto posible ( $m_{ecol}$ ), es necesario resolver la versión discreta del problema (5.1)

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Minimizar} \quad K_C(m^{\Delta t}) \\ \text{sujeto a} \quad m^{\Delta t} \in M^{\Delta t}, \\ \quad \quad \quad \rho(m^{\Delta t})|_{\bar{A}_1 \times [0, T]} \leq \sigma_1. \end{array} \right. \quad (5.14)$$

lo que puede hacerse, por ejemplo, utilizando algoritmo de puntos interiores (ver [79]). Una aproximación de esa solución puede también obtenerse mediante óptimos-Pareto asociados a pesos próximos a  $\lambda^{10}$ . Para ello, nosotros hemos “*afinado*” los pesos entre  $\lambda^9$  y  $\lambda^{10}$  y obtenido los correspondientes óptimos-Pareto resolviendo nuevamente el problema (5.12). Los resultados obtenidos se muestran en el Tabla 5.2, y su correspondiente frente Pareto en la Figura 5.5. Se observa que el Frente conserva una forma claramente convexa y que, si bien no somos capaces de obtener un óptimo-Pareto que lleve a una penalización nula, si podemos hacer que esta sea *tan pequeña como queramos*, aproximandonos a la solución ecológicamente óptima  *$m_{ecol}$  tanto como se desee*. Para ilustra esto, en el Tabla 5.3, se compara la mejor solución óptimo-Pareto (de la Tabla 5.2) con la solución obtenida al resolver el problema (5.14) con el método de puntos interiores descrito con detalle en [79]. Se observa que, si bien la solución óptimo-Pareto es más económica, ésta no satisface las restricciones (aunque en una magnitud que bien podría ser despreciable: sólo en un vértice de la malla triangular perteneciente a  $\bar{A}_1$ , como puede verse en la Figura 5.7)). Finalmente, la total similitud entre ambas soluciones puede apreciarse en la figura 5.6

### Experimento II: Dos zonas a proteger

Consideramos ahora que en el dominio  $\Omega_h$  se pretende proteger las zonas  $\bar{A}_1$  y  $\bar{A}_2$ , con cotas máximas de concentración de CF iguales  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.000348$  y penalizaciones por depuración insuficiente también iguales  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-6}$ .

En este caso, al tener tres funcionales objetivo, el frente Pareto es una superficie. Esa superficie ha sido generada a partir del conjunto  $\underline{\mathcal{P}}_{II}^*$ , obtenido siguiendo el algoritmo descrito en la sección 5.2.3, con  $N_p = 100$ . El resultado obtenido puede verse en la figura 5.8, en la que se aprecia perfectamente el carácter convexo del frente.

El número de óptimos Pareto es ahora elevado y la elección de uno u otro como estrategia de vertido definitiva depende, obviamente, de las preferencias del *decision maker*. Una posibilidad es, por ejemplo, fijar un gasto por depuración y, para ese gasto dado, elegir el óptimo-Pareto en función de la zona ( $\bar{A}_1$  o  $\bar{A}_2$ ) que más interese proteger. Dicho de otro modo, cortar la superficie de la figura 5.8 con el plano  $K_C = cte$  y elegir un punto de la “curva-Pareto” resultante.

Nosotros, únicamente con la intención de ilustrar cual de las dos zonas ( $\bar{A}_1$  o  $\bar{A}_2$ ) es más *sensible* a los vertidos y cual de los dos puntos ( $P_1$  o  $P_2$ ) es más *peligroso*, mostramos, en la tabla 5.4 los valores de los funcionales objetivo para una muestra seleccionada de los pesos generados. Las soluciones óptimos-Pareto correspondientes a esos pesos y las concentraciones de CF a las que conducen esas soluciones se muestran en las figuras 5.9 a 5.12.

Un rápido vistazo parece indicar que la zona  $\bar{A}_2$  es la más sensible y que el punto  $P_2$  es el más peligroso: por ejemplo, para un valor de  $\lambda_C = 0,01$  fijo, cuanto mayor es el peso correspondiente a la zona  $\bar{A}_2$  ( $\lambda_2$ ) mayor es el coste por depuración  $K_C$  (más importante es la depuración). Además, independientemente de que se le de más peso a una u otra zona (que sea más grande el valor de  $\lambda_1$  o de  $\lambda_2$ ), el valor de  $K_2$  es siempre mayor que el de  $K_1$  (la zona  $A_2$  está siempre más contaminada que la zona  $\bar{A}_1$ ) y dentro del valor de  $K_C$ , es más grande el sumando (b) que el sumando (a), es decir, se exige más depuración en la planta 2 que en la planta 1.

$\lambda^i$	(a)	(b)	$K_C(m^{\Delta t})$	$K_1(m^{\Delta t})$
(1,0)	2.1600	2.1600	$4.3200 \times 10^6$	$13050.0 \times 10^6$
(0.9,0.1)	4.8215	4.1442	$8.9658 \times 10^6$	$5.5987 \times 10^6$
(0.8,0.2)	5.0546	4.3841	$9.4387 \times 10^6$	$2.2200 \times 10^6$
(0.7,0.3)	5.1874	4.5290	$9.7164 \times 10^6$	$1.1997 \times 10^6$
(0.6,0.4)	5.2854	4.6390	$9.9244 \times 10^6$	$0.7223 \times 10^6$
(0.5,0.5)	5.3654	4.7330	$10.098 \times 10^6$	$0.4552 \times 10^6$
(0.4,0.6)	5.4361	4.8206	$10.257 \times 10^6$	$0.2886 \times 10^6$
(0.3,0.7)	5.5051	4.9091	$10.414 \times 10^6$	$0.1761 \times 10^6$
(0.2,0.8)	5.5819	5.0070	$10.589 \times 10^6$	$0.0958 \times 10^6$
(0.1,0.9)	5.6823	5.1334	$10.816 \times 10^6$	$0.0384 \times 10^6$
(0,1)	108.723	108.723	$217.450 \times 10^6$	$0.0000 \times 10^6$

Cuadro 5.1: Resultados numéricos: (a) =  $10^{-6} \int_0^T f_1(m_1^{\Delta t}) dt$ , (b) =  $10^{-6} \int_0^T f_2(m_2^{\Delta t}) dt$ .

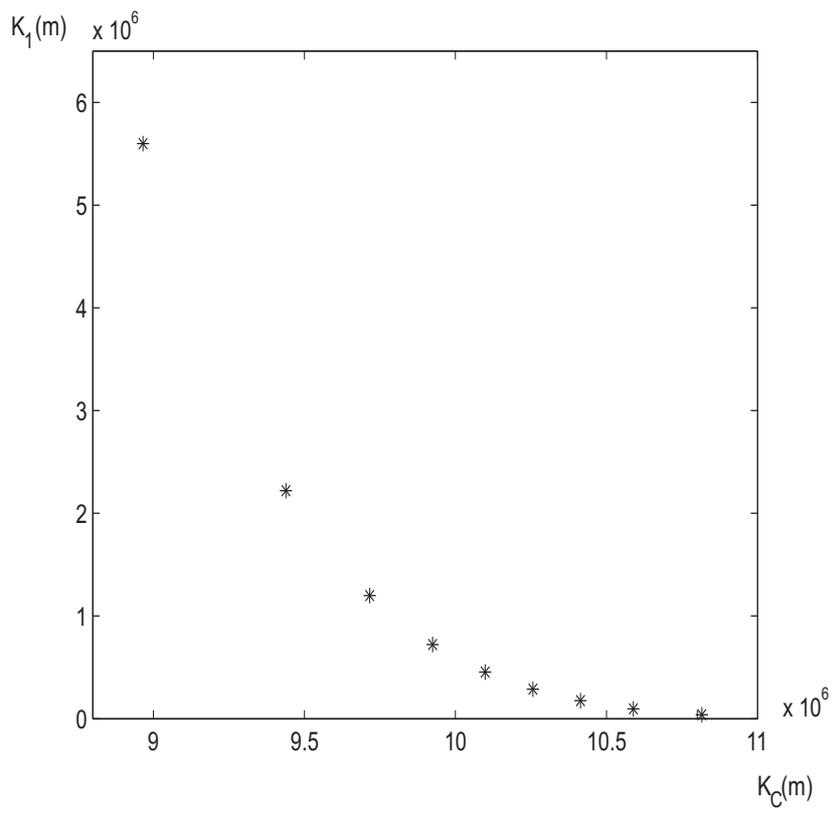


Figura 5.1: Frente Pareto

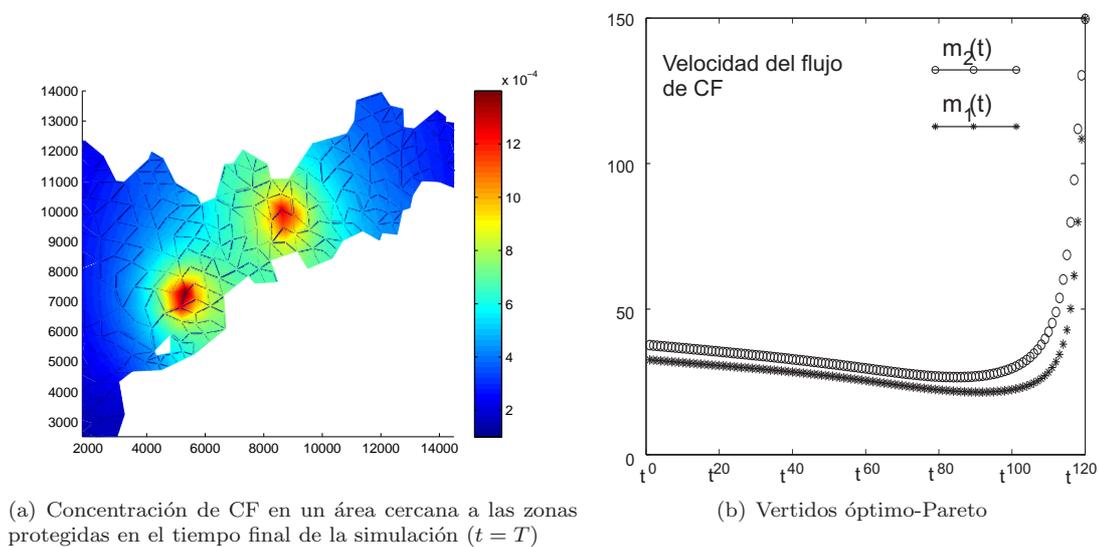


Figura 5.2: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda^1 = (0.9, 0.1)$

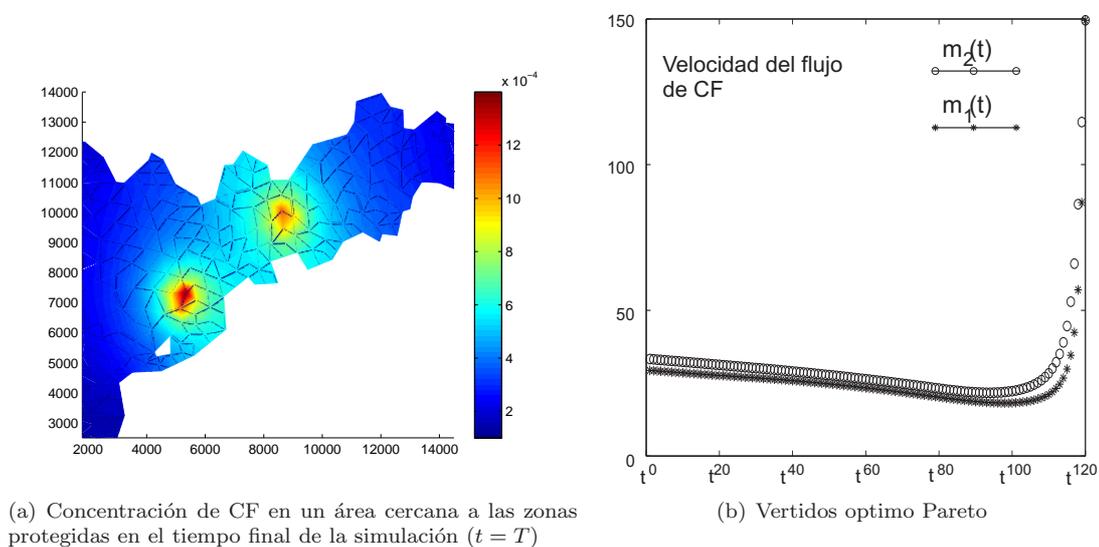


Figura 5.3: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda^5 = (0.5, 0.5)$

$\lambda^t$	(a)	(b)	$K_C(m^{\Delta t})$	$K_1(m^{\Delta t})$
(0.1,0.9)	5.6823	5.1334	$10.816 \times 10^6$	$0.0384 \times 10^6$
(0.095,0.905)	5.6833	5.1370	$10.820 \times 10^6$	$0.0360 \times 10^6$
(0.090, 0.910)	5.6893	5.1451	$10.835 \times 10^6$	$0.0337 \times 10^6$
(0.085, 0.915)	5.6960	5.1535	$10.849 \times 10^6$	$0.0315 \times 10^6$
(0.080, 0.920)	5.7026	5.1622	$10.865 \times 10^6$	$0.0294 \times 10^6$
(0.075, 0.925)	5.7095	5.1712	$10.881 \times 10^6$	$0.0273 \times 10^6$
(0.070, 0.930)	5.7165	5.1806	$10.897 \times 10^6$	$0.0252 \times 10^6$
(0.065, 0.935)	5.7237	5.1904	$10.914 \times 10^6$	$0.0232 \times 10^6$
(0.060, 0.940)	5.7313	5.2007	$10.932 \times 10^6$	$0.0212 \times 10^6$
(0.055, 0.945)	5.7392	5.2116	$10.951 \times 10^6$	$0.0193 \times 10^6$
(0.050, 0.950)	5.7475	5.2232	$10.971 \times 10^6$	$0.0174 \times 10^6$
(0.045, 0.955)	5.7563	5.2356	$10.992 \times 10^6$	$0.0156 \times 10^6$
(0.040, 0.960)	5.7656	5.2489	$11.015 \times 10^6$	$0.0138 \times 10^6$
(0.035, 0.965)	5.7754	5.2635	$11.039 \times 10^6$	$0.0120 \times 10^6$
(0.030, 0.970)	5.7860	5.2797	$11.066 \times 10^6$	$0.0103 \times 10^6$
(0.025, 0.975)	5.7981	5.2978	$11.096 \times 10^6$	$0.0086 \times 10^6$
(0.020, 0.980)	5.8118	5.3186	$11.130 \times 10^6$	$0.0070 \times 10^6$
(0.015, 0.985)	5.8288	5.3432	$11.172 \times 10^6$	$0.0053 \times 10^6$
(0.010, 0.990)	5.8506	5.3742	$11.225 \times 10^6$	$0.0036 \times 10^6$
(0.005, 0.995)	5.8887	5.4152	$11.304 \times 10^6$	$0.0018 \times 10^6$
(0.00001,0.99999)	6.0335	5.5626	$11.596 \times 10^6$	$0.00001 \times 10^6$

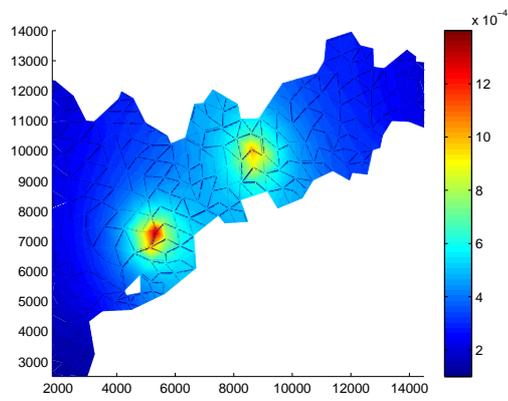
Cuadro 5.2: Resultados numéricos:  $(a) = 10^{-6} \int_0^T f_1(m_1^{\Delta t})dt$ ,  $(b) = 10^{-6} \int_0^T f_2(m_2^{\Delta t})dt$ .

	(a)	(b)	$K_C(m^{\Delta t})$	$K_1(m^{\Delta t})$
Solución del Problema (5.14)	6.1181	5.5989	$11.7170 \times 10^6$	$0.0000 \times 10^6$
Óptimo Pareto correspondiente a $\lambda = (0.00001, 0.99999)$	6.0335	5.5626	$11.596 \times 10^6$	$0.00001 \times 10^6$

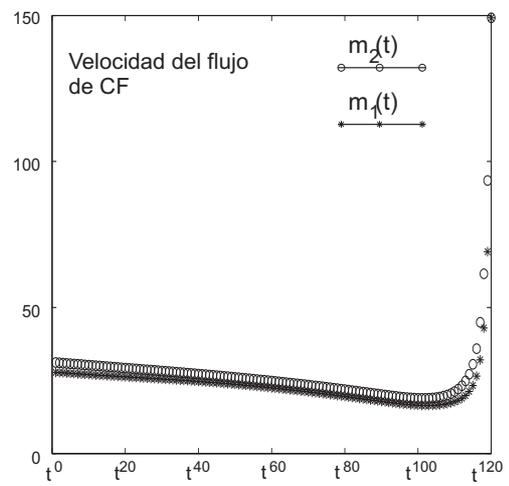
Cuadro 5.3: Resultados numéricos:  $(a) = 10^{-6} \int_0^T f_1(m_1^{\Delta t})dt$ ,  $(b) = 10^{-6} \int_0^T f_2(m_2^{\Delta t})dt$ .

$\lambda$	(a)	(b)	$K_C(m^{\Delta t})$	$K_1(m^{\Delta t})$	$K_2(m^{\Delta t})$
(0.01,0.90,0.09)	4.5888	4.6174	9.2062	$0.0043 \times 10^6$	$0.0407 \times 10^6$
(0.01,0.09,0.9)	4.3122	5.7654	10.078	$0.0050 \times 10^6$	$0.0082 \times 10^6$
(0.01,0.495,0.495)	4.4307	5.4131	9.8438	$0.0032 \times 10^6$	$0.0126 \times 10^6$
(0.5,0.25,0.25)	2.7227	2.8867	5.6094	$0.6928 \times 10^6$	$1.0893 \times 10^6$

Cuadro 5.4: Resultados numéricos:  $(a) = 10^{-6} \int_0^T f_1(m_1^{\Delta t})dt$ ,  $(b) = 10^{-6} \int_0^T f_2(m_2^{\Delta t})dt$ .



(a) Concentración de CF en un área cercana a las zonas protegidas en el tiempo final de la simulación ( $t = T$ )



(b) Vertidos óptimo-Pareto

Figura 5.4: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda^g = (0.1, 0.9)$

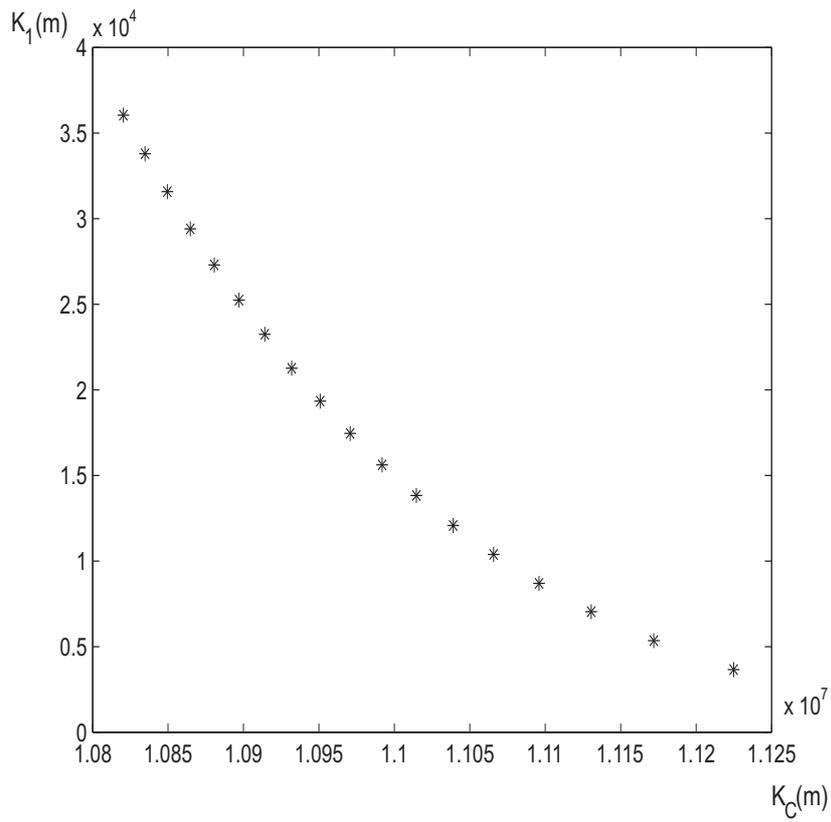


Figura 5.5: Frente Pareto correspondiente a los datos del Tabla (5.2)

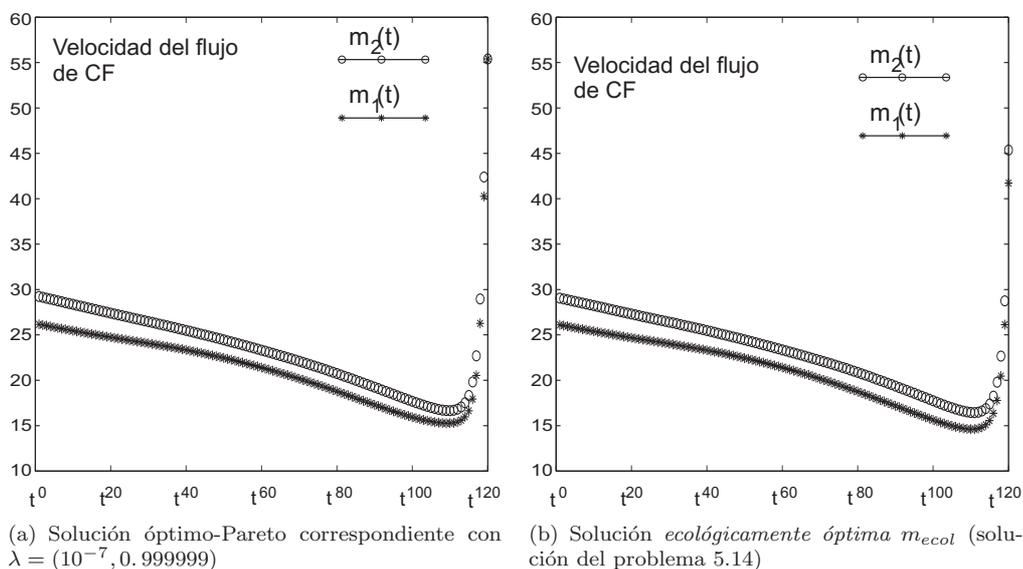


Figura 5.6: Estrategias de vertido

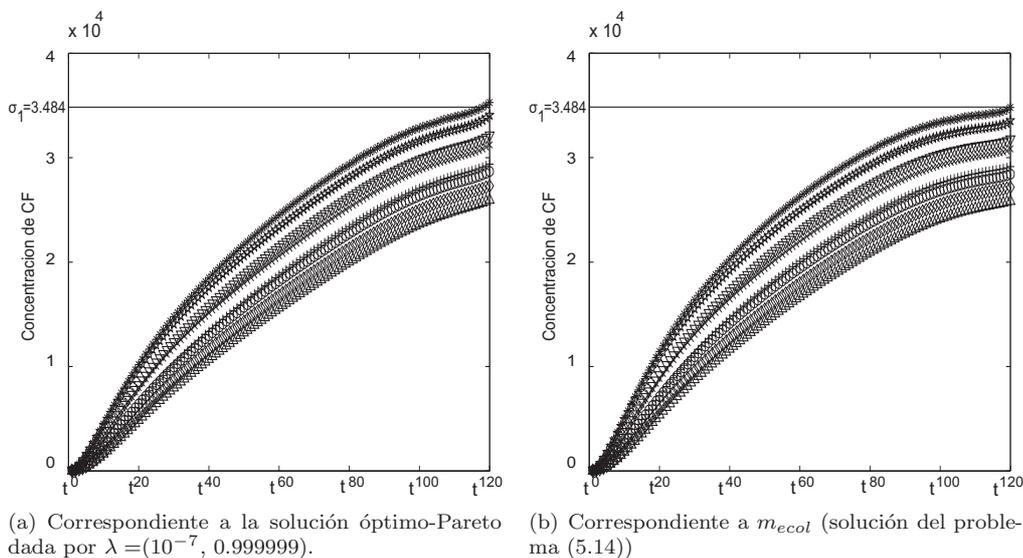


Figura 5.7: Concentraciones de CF a lo largo del tiempo por cada vertice de  $\bar{A}_1$ .

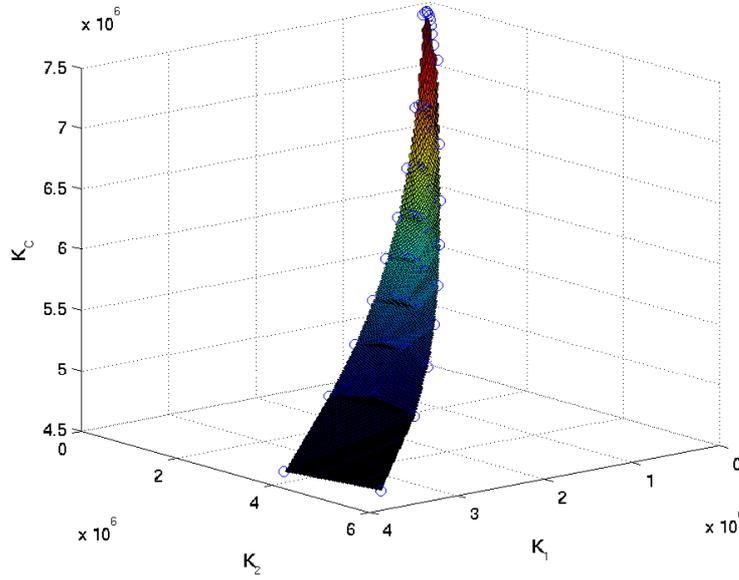
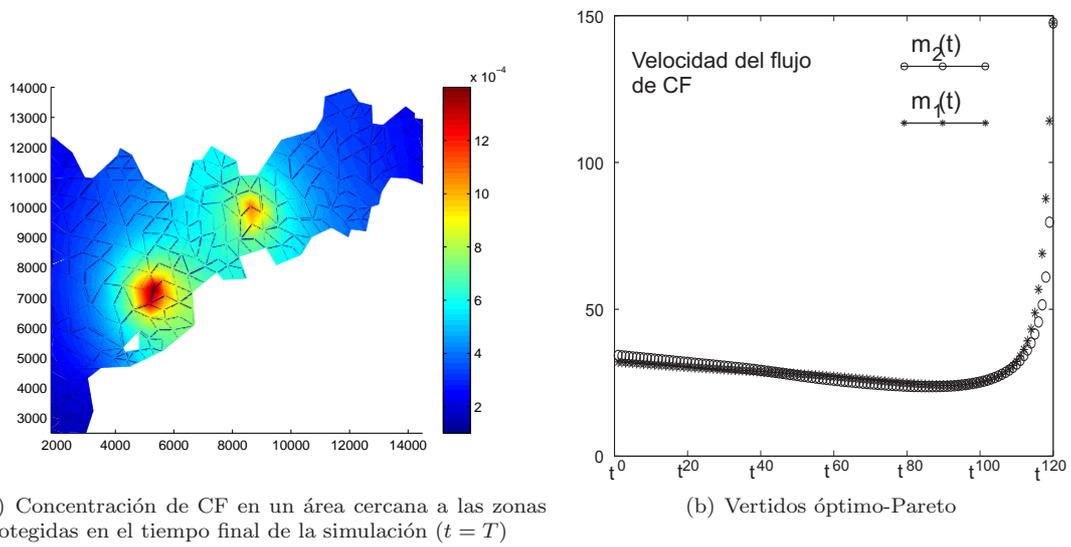


Figura 5.8: Superficie Pareto



(a) Concentración de CF en un área cercana a las zonas protegidas en el tiempo final de la simulación ( $t = T$ )

(b) Vertidos óptimo-Pareto

Figura 5.9: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda = (0.01, 0.9, 0.09)$

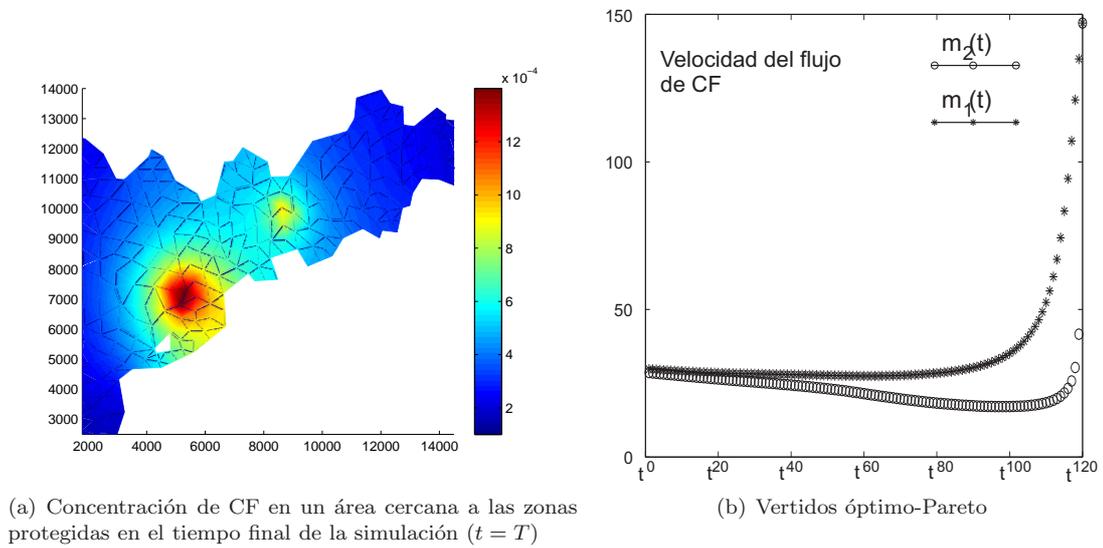


Figura 5.10: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda = (0.01, 0.09, 0.9)$

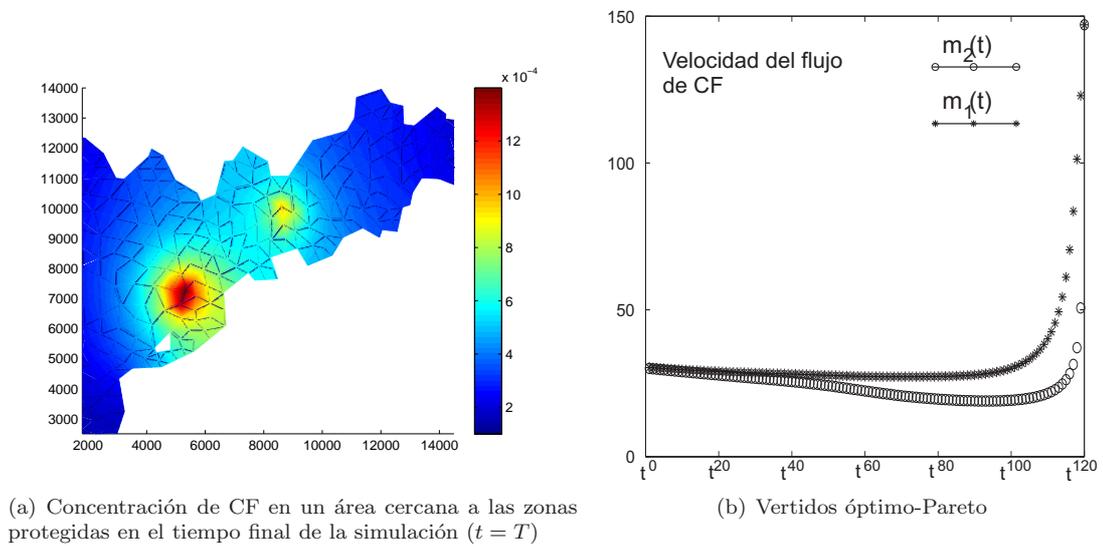
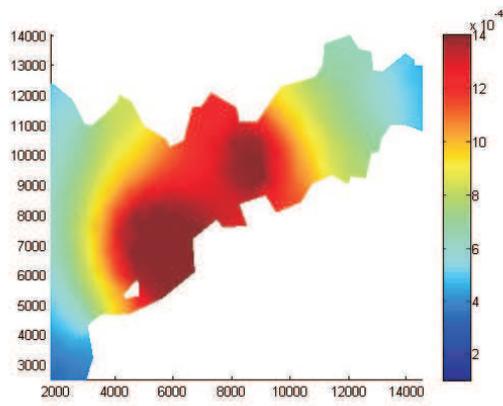
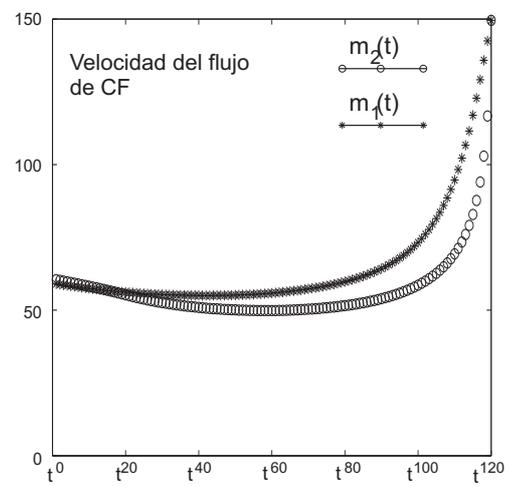


Figura 5.11: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda = (0.01, 0.495, 0.495)$



(a) Concentración de CF en un área cercana a las zonas protegidas en el tiempo final de la simulación ( $t = T$ )



(b) Vertidos óptimo-Pareto

Figura 5.12: Resultados numéricos correspondientes a  $\lambda = (0.5, 0.25, 0.25)$

## Capítulo 6

# SOS: Una toolbox de simulación numérica para ayudar en la toma de decisiones relacionadas con la descarga de aguas residuales y su impacto medioambiental

### 6.1. Introducción

En el presente capítulo se presenta una primera versión del software SOS (acrónimo de Simulating Optimal Solutions), en el que se recoge todo el trabajo desarrollado en esta Tesis.

El objetivo perseguido al elaborar este software ha sido el de disponer de una interfaz gráfica “amigable” con el usuario que sirva de herramienta a todo aquel (investigador, técnico, organismo, etc.) con interés en tres aspectos: (i) la simulación de velocidades y alturas en un dominio ocupado por aguas poco profundas, (ii) la gestión óptima de vertidos de aguas residuales en ese tipo de dominios (trantando simultáneamente aspectos económicos e impacto medioambiental) y (iii) la simulación del impacto medioambiental (en términos de concentraciones de CF) provocados por ese tipo de vertidos.

SOS es una toolbox completamente programada en Matlab, pero que internamente ejecuta programas FORTRAN (previamente compilados) en los que se aborda la resolución numérica de los sistemas de ecuaciones en derivadas parciales necesarios para modelar todos los aspectos mencionados en el párrafo anterior. Esto incluye la resolución de las *ecuaciones de aguas poco profundas* (que serán descritas con detalle en la siguiente sección), la resolución del sistema de estado (1.3) y el cálculo de las *sensibilidades* (matrices

$DG_i$  definidas en la sección 3.1.5).

Tal y como se detallará en las siguientes secciones, la toolbox está dividida en tres módulos diferentes (con sus propios procesos y argumentos de entrada/salida bien definidos) pero completamente relacionados entre sí, lo que le proporcionará a SOS de una notable flexibilidad y gran independencia.

Para finalizar esta introducción indicar que, a nuestro entender, el desarrollo de SOS puede tener relevancia en la actualidad, debido no sólo a la escasez de trabajos publicados sobre el control multiobjetivo de ecuaciones de derivadas parciales (como ya se comentó en la introducción de esta Tesis), sino también debido a que las publicaciones sobre otras toolbox similares a SOS, o bien no contemplan todas las funciones que abarca SOS, o bien no tienen el mismo criterio sobre cómo optimizar la gestión de los vertidos. Así, por una parte, existen trabajos que contemplan la simulación del impacto medioambiental de vertidos de aguas residuales (por ejemplo, [80]), pero que no estudian la gestión óptima de esos vertidos. Por el contrario, en los trabajos en los que se contempla la gestión óptima, el objetivo es optimizar el proceso químico y/o biológico que tiene lugar en las plantas de tratamiento (ver [47] o [51]) y/o el diseño y mantenimiento de la planta (ver [73]), pero no se aborda el estudio del impacto ambiental que provocan esos vertidos.

### Disponibilidad del software

- Título: SOS (Simulation Optimal Solutions).
- Primer año de disponibilidad: 2009
- Requerimientos de hardware: Cualquier Windows XP compatible con PC o superior.
- Lenguaje de programación: Matlab 7.6.0.324(R2008a) y compilador FORTRAN
- Tamaño del programa: 3.12 Mb
- Instalación: La carpeta SOS debe ser copiada al disco duro e incluirse en el path de Matlab. La carpeta tiene que incluir los ficheros de las mallas. SOS se inicia ejecutando el fichero `runSOS.m`.

## 6.2. Organización de SOS

SOS está dividido en tres módulos: Módulo de Simulación de Velocidades, Módulo de Gestión Óptima y Módulo de Simulación de Contaminación (ver esquema en la figura 6.1). Cada uno de ellos resuelve determinados problemas numéricos (modelos) en base a sus respectivos argumentos de entrada (datos del modelo y/o geometría), lo que produce un argumento de salida o resultado (que puede o no, ser guardado en disco).

Los argumentos de entrada pueden ser propios del módulo o un argumento de salida de otro módulo, existiendo cierta dependencia entre los módulos. Aún así, esta dependencia es producto de la elección del usuario y en ningún caso representa limitación alguna.

Lo anterior da al usuario la posibilidad de ejecutar una “sesión” que, de acuerdo a sus necesidades, contemple la ejecución de uno o de varios módulos.

Los posibles estados de una sesión se muestran en la figura (6.1), donde las entradas/salidas obligatorias están representadas por una línea continua, mientras que las entradas/salidas opcionales están representadas por una discontinua.

A continuación presentamos las características y objetivos de cada módulo.

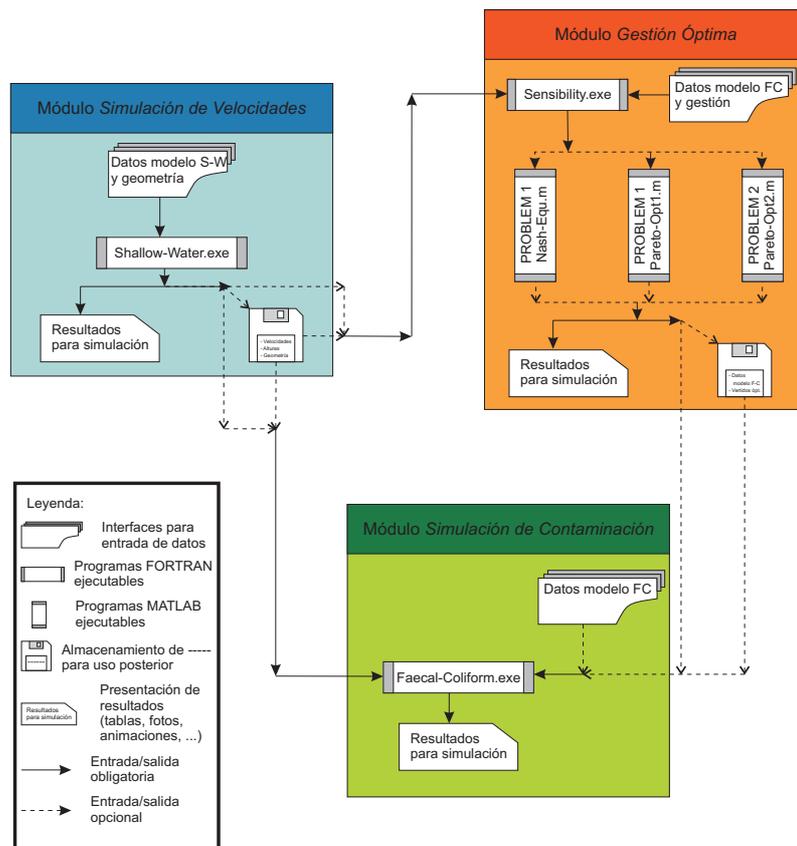


Figura 6.1: Esquema de la organización de SOS, donde se exponen claramente los módulos que lo conforman y sus posibles relaciones obligatorias y opcionales.

■ Módulo de Simulación de Velocidades:

El objetivo del módulo es obtener los campos de velocidades  $u(x, t)$  y alturas  $h(x, t)$  dentro del dominio elegido. Para esto, el módulo resuelve numéricamente las ecuaciones de aguas poco profundas (o ecuaciones de Saint-Venant). Concretamente el modelo matemático que se utiliza es el siguiente:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{Q} = 0 \\ \frac{\partial \vec{Q}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{Q} + gh \vec{\nabla} \eta = \vec{F} - \vec{\nabla} p_a + \frac{1}{\rho} (\tau_w - \tau_f). \end{cases} \quad (6.1)$$

siendo (ver figura 6.2):

- $b(x)$  altura del fondo marino.
- $H(x)$  profundidad con respecto a un nivel de referencia fijo.
- $h(x, t)$  altura del agua sobre el punto dado por  $x$  en el instante  $t$ .
- $\eta$  sobreelevación, esto es:  $\eta = h - H$ .
- $\vec{u}$  velocidad horizontal promediada.
- $\vec{Q} = h\vec{u}$  caudal por unidad de longitud.
- $p_a$  presión atmosférica.
- $\vec{F} = 2\omega \text{sen}\Phi(Q_2, -Q_1)$  efecto *Coriolis*, donde:
  - $\Phi$  latitud.
  - $\omega$  velocidad angular de la Tierra.
- $\tau_f = \frac{\rho g \vec{u} |\vec{u}|}{C^2}$  rozamiento con el fondo, donde:
  - $g$  aceleración de la gravedad.
  - $\rho$  densidad del agua.
  - $|\vec{u}| = \sqrt{u_1^2 + u_2^2}$ .
  - $C$  coeficiente *Chezy*.
- $\tau_w = \gamma_{10} \vec{v} |\vec{v}|$  tensión tangencial debido al viento, donde:
  - $\vec{v} = (v_1, v_2)$  velocidad del viento 10m por encima de la superficie del agua.
  - $\gamma_{10}$  se calcula en [18] como:
 
$$\gamma_{10} = \rho_{air} (0,75 + 0,067|v|) 10^{-3},$$
 siendo  $\rho_{air}$  la densidad del aire (o coeficiente de Daire)

Las condiciones de contorno para (6.1) son de dos tipos :

1. Costa o efluente ( $\Gamma_0$ ):

$$\vec{Q}\vec{\nu} = f, \text{ donde } \vec{\nu} \text{ es el vector unitario normal, } (f = 0 \text{ en la costa}).$$

2. Mar abierto ( $\Gamma_1$ ):

$$h = \psi + H, \text{ donde } \psi \text{ es una función onda dada;}$$

mientras que las condiciones iniciales vienen dadas por:

$$h(x, 0) = h_0(x),$$

$$\vec{u}(x, 0) = \vec{u}_0(x).$$

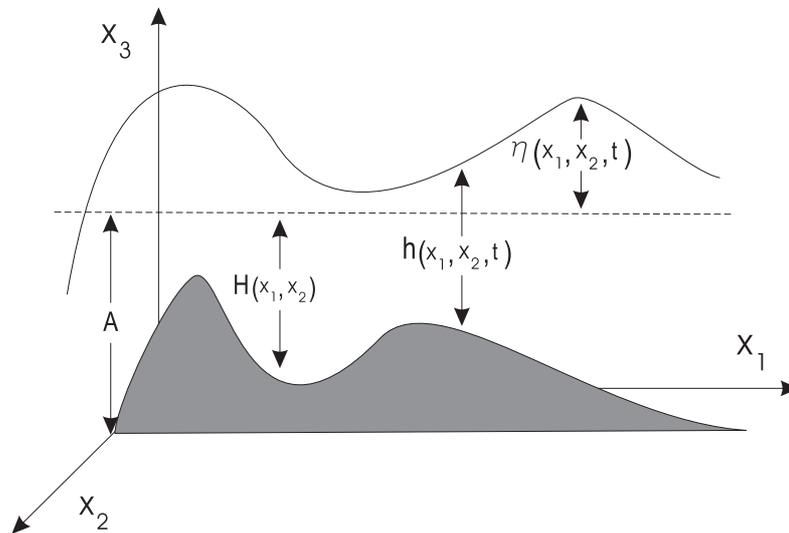


Figura 6.2: Esquema tridimensional de un dominio ocupado por aguas poco profundas.

La solución numérica de (6.1) puede ser obtenida por métodos de diferencias finitas, elementos finitos o volúmenes finitos. SOS incluye un código FORTRAN (Shallow-water.exe) que resuelve (6.1) utilizando un método que combina características para la discretización temporal con elementos finitos de Raviart-Thomas para la discretización espacial. Este código, empleado con éxito en trabajos previos (ver [61] y [9]) ha sido desarrollado por A. Bermúdez, C. Rodríguez y M. A. Vilar [18], quienes desinteresadamente nos han permitido incluirlo en SOS.

- Módulo de Gestión Óptima (Optimización):

El objetivo ahora es generar vertidos de aguas residuales que sean óptimos, en el sentido de que sean generados como producto de la resolución de uno de los problemas de optimización multiobjetivo planteados y estudiados en el transcurso de esta Tesis, nos referimos pues a la resolución de los Problemas I y II ((1.7) y (1.10), respectivamente).

Como en su momento se comentó, la resolución de dichos problemas requiere el campo de velocidades  $u(x, t)$  y las alturas  $h(x, t)$ , por lo que queda clara la dependencia del módulo a la ejecución previa del Módulo de Simulación de Velocidades (ver 6.1).

En cuanto a la función del módulo en sí, este se basa en obtener las sensibilidades (matrices  $DG_l$ ). Para ello se ejecuta un programa FORTRAN (Sensibility.exe), que incluye las técnicas y algoritmos numéricos descritos en la sección 3.1.5 para obtener dichas matrices.

Como ya se ha indicado en la mencionada sección 3.1.5, el conocimiento de las matrices  $DG_l$  permite evaluar los funcionales objetivo y sus gradientes de modo directo, sin necesidad de resolver ningún tipo de ecuación adicional. Es por ello que las matrices  $DG_l$  son, junto a los datos característicos del problema, los únicos argumentos de entrada para los algoritmos numéricos programados en Matlab que resuelven los Problemas I y II, y que contemplan los esquemas de Nash y la optimalidad de Pareto (programas Nash-Equ.m, Pareto-opt1.m y Pareto-opt2.m).

- Módulo de Simulación de Contaminación:

El tercer módulo de SOS (Módulo de Simulación de Contaminación) genera las concentraciones  $\rho(x, t)$  de CF provocadas por los vertidos de aguas residuales  $m(t)$ . Esos vertidos pueden ser el argumento de salida del Módulo de Gestión Óptima, o bien pueden ser proporcionados por el usuario de dos formas distintas: como un vertido constante o a través de un fichero `.mat` que contenga los vertidos en todos los tiempos. Así, la dependencia del presente módulo respecto al Módulo de Simulación de Velocidades es obligatoria, mientras que respecto al Módulo de Gestión Óptima depende de la elección del usuario (fig. 6.1).

Para lograr el cálculo de las concentraciones, SOS incorpora un algoritmo numérico programado en FORTRAN (Faecal-Coliform.exe) que resuelve el problema de estado (1.3), y cuyos argumentos de entrada son: los campos de velocidad  $u(x, t)$  y altura  $h(x, t)$ , y los vertidos de aguas residuales  $m(t)$  mencionados arriba.

### 6.3. Ejecución de SOS

Como ya hemos señalado, SOS es una toolbox que permite el cálculo de diversos factores que intervienen en la problemática medioambiental que nos ocupa en la presente Tesis. Nos referimos a factores como velocidad  $u(x, t)$  y altura  $h(x, t)$  de agua, generación de vertidos óptimos en el sentido de Nash y/o Pareto y, finalmente, al impacto medioambiental de esos vertidos (en términos de concentraciones de CF).

A continuación detallamos la ejecución de SOS a través de un ejemplo. En esta primera versión de SOS, independientemente de que el usuario pueda incorporar mallados de dominios a través de ficheros en formato *estandar*, se incluyen las mallas de algunas de las rías gallegas (elaboradas por la profesora Carmen Rodríguez Iglesias). Elegimos para ilustrar el funcionamiento de SOS la ría de Arousa, una de las de mayor interés turístico y pesquero en Galicia.

Ejecutamos los tres módulos partiendo de la ventana principal de SOS (figura 6.3). Para cada uno de ellos introducimos los datos, ejecutamos, y mostramos los resultados obtenidos.



Figura 6.3: Toolbox de SOS, donde apreciamos claramente la opción de elegir cualquiera de los tres módulos que conforman el software.

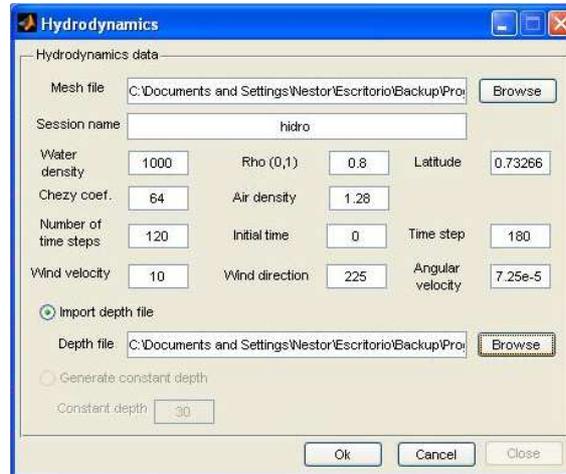


Figura 6.4: Módulo de Simulación de Velocidades, ejecutado en la ría de Arosa.

### Módulo de Simulación de Velocidades

Observamos en la figura 6.4, la ventana correspondiente al Módulo de Simulación de Velocidades, donde aparecen los valores de los parámetros que requiere el algoritmo numérico que resuelve las ecuaciones de aguas poco profundas, de los que destacamos:

- Densidad del agua  $\rho_{water} = 2000 \text{ kg/m}^3$
- Coeficiente de Chezy  $= 64 \text{ m}^{\frac{1}{2}}/\text{s}$
- Velocidad del viento  $\vec{v} = 10 \text{ m/s}$
- Latitud norte  $\Phi = 0,73226 \text{ rad}$
- Densidad del aire  $\rho_{air} = 1,28 \text{ kg/m}^3$
- Velocidad angular de la Tierra  $\omega = 7,25 \times 10^{-5} \text{ rad/s}$
- Parámetro  $\rho = 0,8$  del algoritmo iterativo de Bermudez-Moreno [18] utilizado internamente en la resolución del sistema (6.1), y cuyo valor se debe tomar en el intervalo  $(0, 1)$ .

Los resultados pueden ser visualizados tanto en animación (con opción de generar un fichero .avi) como por cada "frame" de dicha animación, que es la opción que aparece en la figura 6.5.

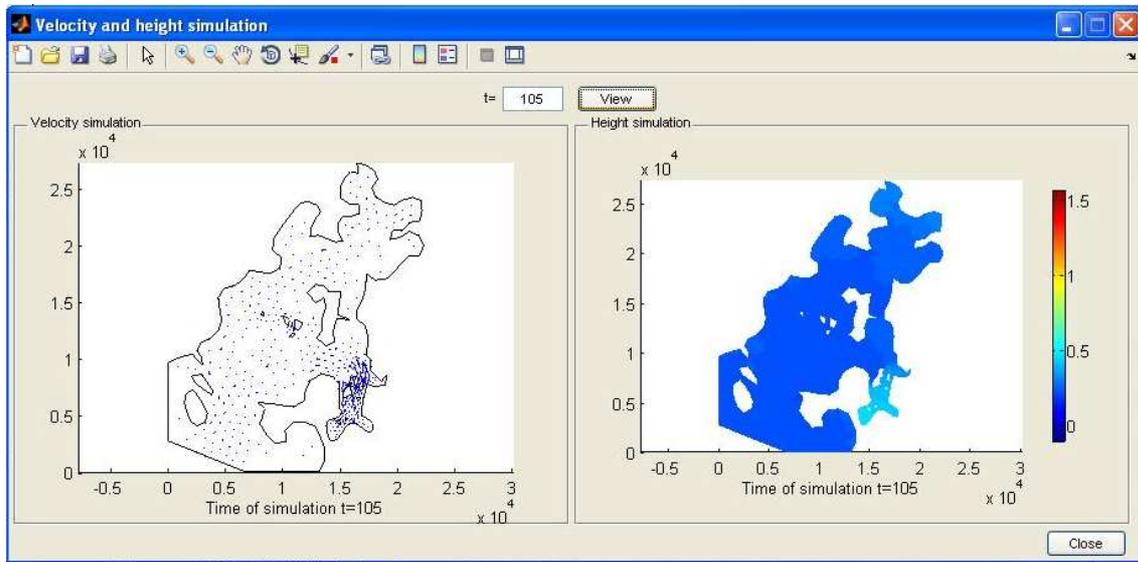


Figura 6.5: Resultados del Módulo de Simulación de Velocidades: a la izquierda observamos el campo de velocidades  $u(x, t)$ , mientras que a la derecha puede verse la altura  $h(x, t)$ .

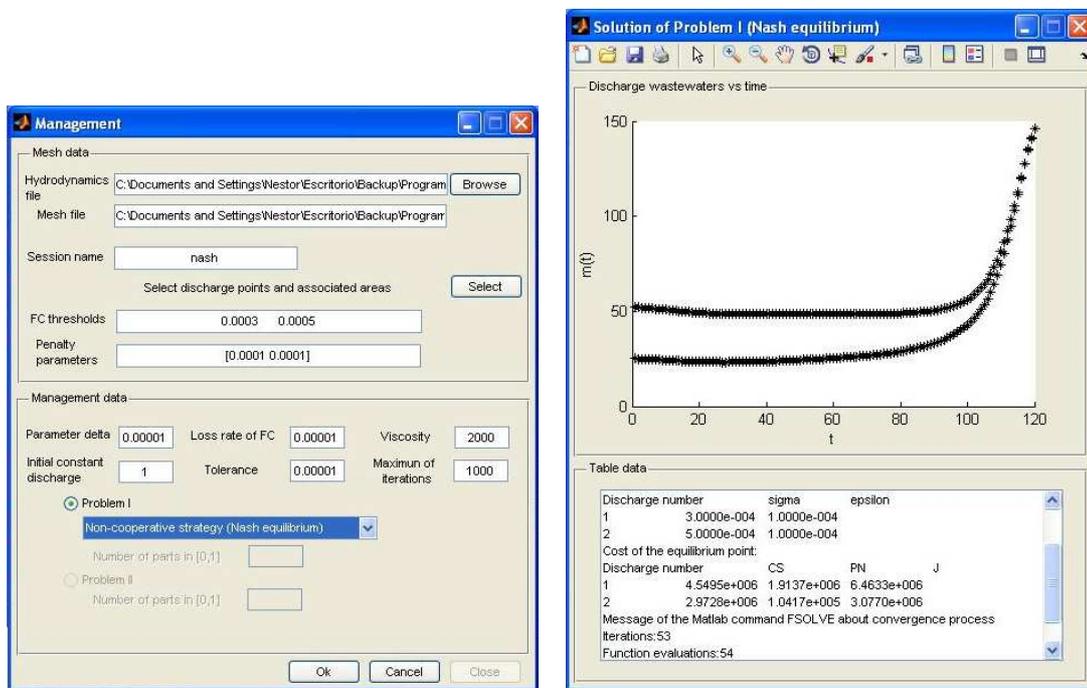
### Módulo de Gestión Óptima

Una vez realizada la ejecución anterior, y almacenados en disco sus resultados, continuamos la ejecución de SOS, con el Módulo de Gestión (ver fig 6.6(a)) donde importamos un fichero `.mat` que contiene, entre otros datos, la geometría del dominio y los campos de velocidades  $u(x, t)$  y alturas  $h(x, t)$ . Las zonas a proteger y los puntos de vertido son seleccionados a través de la ventana que se muestra en la figura 6.7. Destacamos además los siguientes parámetros:

- $\delta = 10^{-5}$ , parámetro que tiene que ver con la regularización de la función parte positiva  $(\rho - \sigma_i)_+^2$  (página 42),
- viscosidad  $\beta = 2000 \text{ m}^2/\text{s}$ ,
- coeficiente experimental que mide la mortandad de CF  $\kappa = 1,15^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ ,
- parámetros de penalización por la depuración insuficiente  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-6}$ ,
- cotas de concentración máxima de CF  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0,0003$ .

Finalmente, elegimos resolver el Problema I mediante la búsqueda de un Equilibrio de Nash, y los resultados obtenidos se observan en la figura 6.6(b), donde se presenta una gráfica con los vertidos correspondientes al punto de equilibrio, y una tabla de datos,

donde aparecen los valores de algunos parámetros del modelo, los costes correspondientes a los vertidos y un mensaje de texto acerca de la convergencia.



(a) Módulo de Gestión Óptima, donde elegimos la resolución del Problema I, bajo la teoría del Equilibrio de Nash

(b) Resultados del Módulo de Gestión Óptima, observamos los vertidos óptimos según el Equilibrio de Nash  $m(t)$ , y una pequeña tabla donde aparecen los costes.

Figura 6.6: Módulo de Gestión Óptima: ventana y resultados

## Módulo de Simulación de Contaminación

Por último, presentamos la ejecución del Módulo de Simulación de Contaminación con el que se pretende mostrar el impacto medioambiental en la ría de Arosa provocado por los vertidos óptimos obtenidos anteriormente. Para ello importamos, a través de la ventana que se muestra en la figura 6.8, los ficheros .mat obtenidos como argumentos de salida de los módulos anteriores. Los resultados se pueden apreciar en la figura 6.9.

Cabe señalar que, al igual que en el módulo de simulación de velocidades, SOS tiene la opción de presentar los resultados con una animación o por "frames" individuales, como es el caso presentado.

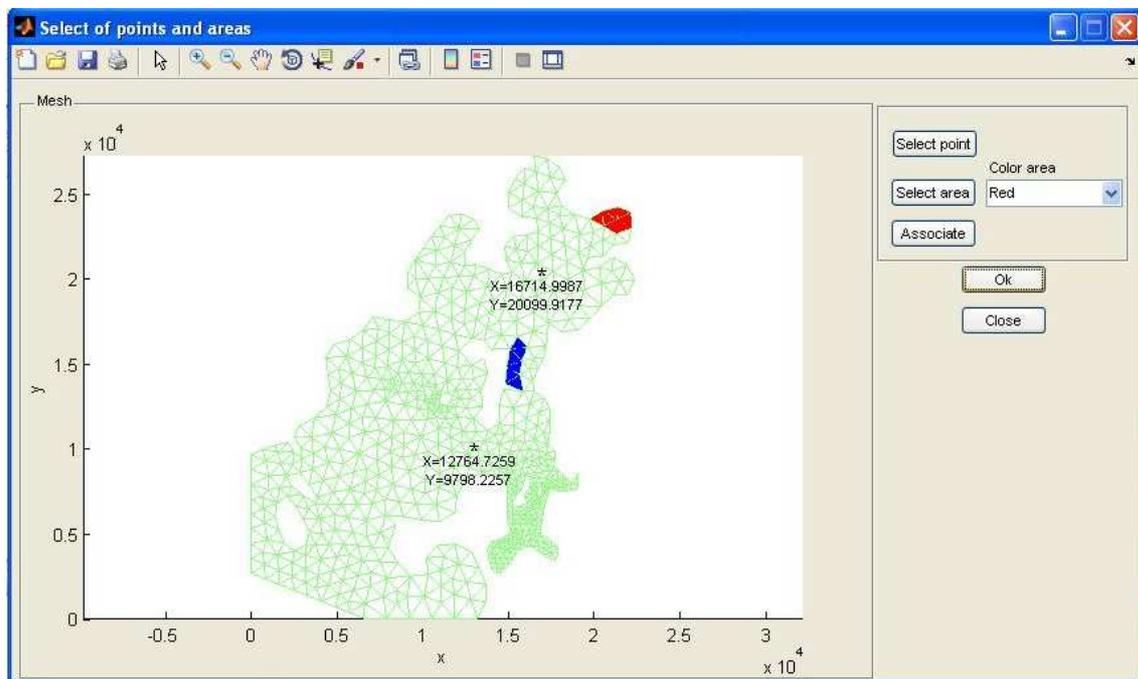


Figura 6.7: Puntos de vertido y zonas a proteger en la ría de Arosa, seleccionados en SOS.

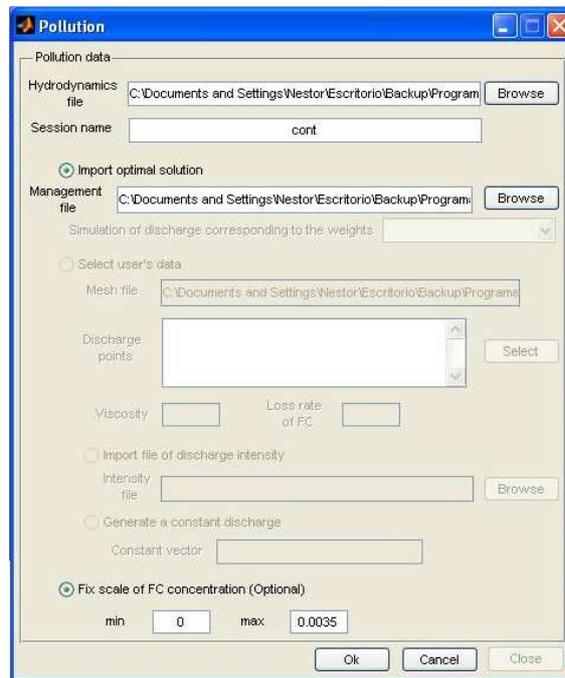


Figura 6.8: Módulo de Simulación de Contaminación, donde cargamos las velocidades y los vertidos óptimos generados por los módulos anteriores.

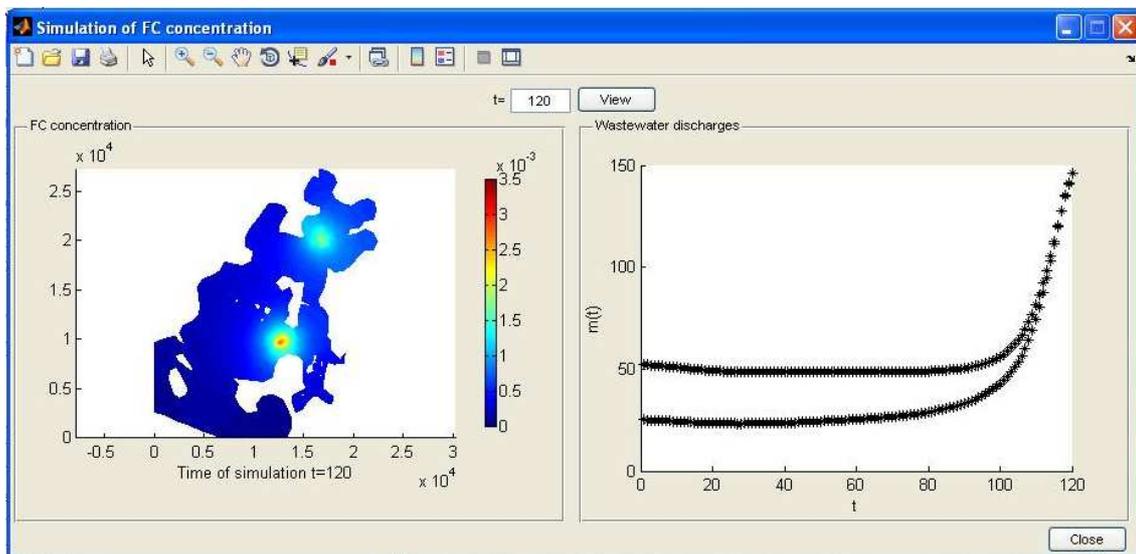


Figura 6.9: Módulo de Simulación de Contaminación: resultados (a la izquierda las concentraciones de CF, a la derecha los vertidos óptimos)



# Apéndice A

## SOS: Guía de usuario

### A.1. Descripción de la toolbox

La toolbox de SOS contiene cuatro menús desplegables:

- **File**

Desde este menú se manejan las sesiones de los tres módulos que conforman SOS. Este menú contiene las siguientes opciones:

- **New session** Permite abrir una sesión de cualquiera de los tres módulos: *Hydrodynamics*, *Management*, *Pollution*.
- **Open file** Busca y carga en la toolbox una sesión previa guardada en disco como un fichero `.mat`.
- **Delete** Borra cualquier sesión guardada en disco como un fichero `.mat`.
- **Save** Guarda en disco una sesión. Se guardan datos y resultados correspondientes a una sesión en un fichero `.mat`, de tal modo que mientras no se concluya la ejecución de una nueva sesión, esta sesión permanecerá desactivada.
- **Close** Cierra la toolbox.

- **Compute**

Este menú sólo se activa una vez que el usuario ha transferido a la toolbox los datos de una nueva sesión. Dentro de él, sólo está activo el cómputo del módulo correspondiente a la sesión iniciada y una vez escogido se inician los cálculos. Durante la ejecución (que puede durar varios minutos dependiendo del módulo elegido) un reloj de arena indica que el cálculo aún no ha concluido.

- **Solutions**

Desde las opciones de este menú se pueden ver los resultados de cualquier sesión.

Sólo está activa cuando el cómputo de una nueva sesión ha concluido o cuando se ha cargado una sesión previa, guardada en disco.

- Help

Este menú contiene el manual de usuario de SOS (en inglés y español) e información acerca de SOS.

## A.2. Ejecución de los distintos módulos de SOS

Indicamos a continuación los pasos a seguir para ejecutar una nueva sesión de cada uno de los tres módulos de SOS.

### Módulo de Simulación de Velocidades (*Hydrodynamics*)

1. Abrir la toolbox ejecutando en la línea de comando `runSOS`,
2. Elegir File → New session → Hydrodynamics. Aparece una nueva ventana en la que se debe:
  - a) Elegir un fichero que contenga la malla del dominio.
  - b) Introducir el nombre de la sesión.
  - c) Introducir los parámetros propios de la simulación: Water density ( $kg/m^3$ ),  $\rho \in (0, 1)$ , Latitude ( $rad$ ), Chezy coef. ( $m^{1/2}/s$ ), Air density ( $kg/m^3$ ), Number of time steps, Initial time ( $s$ ), Time step ( $s$ ), Wind velocity ( $m/s$ ), Wind direction ( $deg$ ), Angular velocity ( $rad/s$ ).
  - d) Elegir entre importar un fichero de profundidad (en cuyo caso es necesario proporcionar un fichero `.prof`) o generar una profundidad constante (e introducirla).
  - e) Presionar el botón Ok. Presionando ese botón la información es transferida a la toolbox.
  - f) Cerrar la ventana presionando Close (Opcional).
3. Elegir Compute → Hydrodynamics. Aparecerá una ventana con un reloj de arena y el mensaje “*Computing solution*”. Esto indica que la resolución del módulo está en proceso, cuando se cierre, la resolución habrá terminado y los resultados habrán sido transferidos a la toolbox. En ese momento en el menú Solutions se activará la opción correspondiente.
4. a) Elegir Solutions → Hydrodynamics → Bathymetry, si deseamos ver la batimetría del dominio.

- b) Elegir **Solutions** → **Hydrodynamics** → **Animation**, si deseamos ver la animación de la simulación.
  - c) Elegir **Solutions** → **Hydrodynamics** → **Frames**, si deseamos ver el *frame* correspondiente a un instante de tiempo concreto.
5. Elegir **File** → **Save** para guardar la sesión en disco. Por defecto SOS sugiere guardarlo en la carpeta **SOS/Hydrodynamics** con el nombre ‘nombre-sesión’ ‘nombre-malla’.mat.
- IMPORTANTE: Para utilizar las velocidades y alturas que se acaban de generar en otro módulo es necesario guardar previamente la sesión en disco.

### Módulo de Gestión Óptima (*Management*)

1. Abrir la toolbox ejecutando en la línea de comando **runSOS**.
2. Elegir **File** → **New session** → **Management**. Aparece una nueva ventana en la que se debe:
  - a) Elegir un fichero **.mat** que contenga una sesión previa del módulo de simulación de velocidades (*Hydrodynamics file*). Automáticamente se carga el fichero de la malla en el espacio *Mesh file*.
  - b) Introducir el nombre de la sesión.
  - c) Elegir los puntos de vertido y las zonas a proteger. Para ello, al lado del texto “*Select discharge points and associate areas*” presionar el botón **Select**. Aparecerá una ventana nueva que contiene la malla y unos botones de control. Entonces es necesario proceder estrictamente de la siguiente manera:
    - **Paso 1** (Elegir un punto de vertido): Presionar el botón **Select point** (automáticamente cambia la forma del cursor del mouse) y, a continuación, con el botón izquierdo del mouse, dar un *click* en el punto de vertido deseado. El punto es marcado y se indican sus coordenadas.
    - **Paso 2** (Elegir una zona): Elegir un color del menú **Color area** (por defecto el color es azul), presionar el botón **Select area** (automáticamente cambia la forma del cursor del mouse) y, a continuación, con el botón izquierdo del mouse seleccionar los triángulos que conforman la zona. Al hacerlo los elementos se tornan del color elegido.
    - **Paso 3** (Definir la zona): Dar un *click* con el botón derecho sobre la zona y elegir **Definition area**. Repetir el *click* con el botón derecho sobre la zona y elegir **Threshold of FC**. Aparece una nueva ventana en la que se debe

introducir la cota máxima de CF correspondiente a esa zona y a continuación se deben pulsar los botones **Ok** y **Close**.

Si se desean seleccionar más zonas se deben repetir los pasos 2 y 3.

OBSERVACIÓN: En la versión suministrada, los cálculos sólo se pueden hacer con una zona por cada punto de vertido.

- **Paso 4** (Asociar puntos y zonas): Presionar el botón **Associate** para asociar el punto de vertido con las zonas definidas en los pasos 2 y 3.

IMPORTANTE: Es indispensable haber seguido el orden establecido anteriormente. En caso de error, será necesario cerrar la ventana que contiene la malla presionando **Close** e iniciar el proceso de nuevo.

Si se desean elegir más puntos de vertido (con sus respectivas zonas asociadas) deben de repetirse los pasos 1 a 4.

OBSERVACIÓN: En la versión suministrada, los cálculos sólo se pueden hacer con dos puntos de vertido para el Problema I y un punto para el Problema II.

- **Paso 5** (Transferir los datos a la toolbox): Pulsar los botones **Ok** y **Close** (Opcional).

- d) Introducir los parámetros de penalización para cada una de las plantas. En el espacio “*Penalty parameters*”, hay que escribir un vector fila (en formato Matlab). La *i*-ésima componente de ese vector se asigna como penalización para la *i*-ésima planta. Observar que las componentes del vector deben ser todas positivas y que, cuanto más pequeñas son, mayor es la penalización en la planta correspondiente.
- e) Introducir los parámetros propios del módulo: Parameter  $\delta$  (parámetro adimensional, positivo, “suficientemente pequeño”), Loss rate of FC ( $m^2/s$ ), Viscosity ( $m^2/s$ ), Initial constant discharge, Tolerance (parámetro adimensional, positivo, “suficientemente pequeño”) y Maximum of iterations (número natural, “suficientemente grande”).
- f) Elegir el tipo de Problema a resolver. Hay dos opciones:
  - Problem I: puede ser resuelto en forma no-cooperativa (Equilibrio de Nash) o en forma cooperativa (Optimalidad de Pareto).
  - Problem II: sólo puede ser resuelto a través de la optimalidad de Pareto.

Si se escoge la optimalidad de Pareto es necesario además indicar el número de pesos que se pretenden generar ( $N_p$ , definido en el Algoritmo 2, sección 3.2.4)
- g) Presionar el botón **Ok**. Presionando ese botón la información es transferida a la toolbox
- h) Cerrar la ventana presionando **Close** (Opcional).

3. Elegir `Compute` → `Management`. Aparecerá una ventana con un reloj de arena y el mensaje “*Computing solution*”. Esto indica que la resolución del módulo está en proceso, cuando se cierre, la resolución habrá terminado y los resultados habrán sido transferidos a la toolbox. En ese momento, en el menú `Solutions` se activarán las opciones correspondientes.
4. a) Elegir `Solutions` → `Hydrodynamics`, si se desean ver los campos de velocidades y alturas utilizados para resolver el problema.
- b) Elegir `Solutions` → `Management`. Aparece una ventana que contiene una gráfica de los vertidos óptimos y una tabla con información relacionada (costes, penalizaciones, etc.).

Elegir `File` → `Save` para guardar la sesión en disco. Por defecto SOS sugiere guardarlo en la carpeta `SOS/Management` con el nombre ‘nombre-sesión’ ‘nombre-malla’.mat.

IMPORTANTE: Para utilizar en otro módulo los vertidos óptimos que se acaban de generar, es necesario guardar previamente la sesión en disco.

#### Módulo de Simulación de Contaminación (*Pollution*)

1. Abrir la toolbox ejecutando en la línea de comando `runSOS`,
2. Elegir `File` → `New session` → *FC* `Pollution`. Aparece una nueva ventana en la que se debe:
  - a) Elegir un fichero `.mat` que contenga una sesión previa del módulo de simulación de velocidades (*Hydrodynamics file*). Automáticamente se carga el fichero de la malla en el espacio *Mesh file*.
  - b) Introducir el nombre de la sesión.
  - c) Elegir importar un fichero `.mat` con una sesión previa del módulo de gestión óptima (*Management file*) o proporcionar los datos de forma manual. En el primer caso marcar “*Import optimal solution*” y elegir el fichero correspondiente. En el segundo, marcar “*Select user’s data*”, y proceder del siguiente modo:
    - Elegir puntos de vertido: Presionar el botón `Select`. Aparecerá una ventana con la malla del dominio y unos botones de control. En esa ventana hay que presionar el botón `Select point` (automáticamente cambia la forma del cursor del mouse) y, a continuación, hacer un *click* con el botón izquierdo del mouse en el punto de vertido deseado. Si se desean elegir más puntos de vertido, se repite el proceso y una vez concluido, se presionan los botones

- ], para transferir la información a la ventana del módulo y  para cerrar la ventana (Opcional).
- Introducir los parámetros propios del modelo: Loss rate of FC ( $m^2/s$ ), Viscosity ( $m^2/s$ ).
  - Elegir entre importar un fichero `.mat` con la intensidad del vertido, o generar un vertido de intensidad constante. En el segundo caso, introducir un vector fila (en un formato Matlab) en el espacio “*Constant vector*”. La  $i$ -ésima componente es la magnitud del vector constante del  $i$ -ésimo punto de vertido.
- d) Si se desea, se puede fijar una escala de la concentración de CF (Opcional). Para ello hay que marcar “*Fix scale of FC concentration*” y dar un valor mínimo y otro máximo. Si no se fija una escala, SOS la proporciona a partir de los valores mínimo y máximo de la concentración de CF obtenida en la simulación.
- e) Presionar el botón . Presionando ese botón la información es transferida a la toolbox
- f) Cerrar la ventana presionando  (Opcional).
3. Elegir  → . Aparecerá una ventana con un reloj de arena y el mensaje “*Computing solution*”. Esto indica que la resolución del módulo está en proceso, cuando se cierre, la resolución habrá terminado y los resultados habrán sido transferidos a la toolbox. En ese momento, en el menú  se activarán las opciones correspondientes.
4. a) Elegir  → , si se desean ver los campos de velocidades y alturas utilizados para resolver el problema.
- b) Elegir  → . Aparece una ventana que contiene una gráfica de los vertidos óptimos y una tabla de datos (Costos, penalizaciones, etc.), de la sesión previa del módulo de gestión óptima. Esta opción sólo estará activa cuando se haya introducido en los datos un “*Management file*”
- c) Elegir  →  → , si se desea ver la animación de la simulación del impacto ambiental provocado por los vertidos de aguas residuales.
- d) Elegir  →  → , si se desea ver el *frame* correspondiente a un instante concreto de tiempo en la animación anterior.
5. Elegir  →  para guardar la sesión en disco. Por defecto SOS sugiere guardarlo en la carpeta `SOS/Pollution` con el nombre ‘`nombre-sesión`’ ‘`nombre-malla`’.`mat`.

*Observaciones:* Las ventanas correspondientes a los tres módulos que conforman SOS, son en realidad “functions” de Matlab. En consecuencia, cada vez que se abren desde la toolbox, siempre se espera que al presionar el botón **Ok**, regresen argumentos de salida. Lo anterior tiene dos consecuencias:

1. Sólo es posible ejecutar un módulo a la vez.
2. En caso de error o necesidad de cerrar una ventana, es obligatorio presionar el botón **Cancel** y a continuación el botón **Close**. Así el argumento de salida es nulo, más no vacío, lo que evita que Matlab nos muestre un error en la ventana de comandos (algo que si ocurre al cerrar la ventana con el botón 'X' de la parte superior derecha de la ventana).

### A.3. Cargar una sesión guardada en disco

Para cargar una sesión es necesario realizar los siguientes pasos:

1. Abrir la toolbox ejecutando en la línea de comando `runSOS`,
2. Elegir **File** → **Open file**. Aparece una nueva ventana en la que, se debe buscar el fichero `.mat` correspondiente a la sesión que se desea cargar y a continuación presionar **Open sesion**.  
SOS automáticamente detecta el módulo al que pertenece la sesión, por lo que abre la ventana con los datos correspondientes, pero con todas las opciones desactivadas (no puede cambiarse ningún dato).
3. En la ventana del módulo presionar **Ok**, para transferir la información a la toolbox.
4. Si se desean ver los resultados, ir a la toolbox, desplegar el menú **Solutions** y elegir la opción deseada entre las opciones activadas.



# Bibliografía

- [1] L. J. Alvarez Vázquez, E. Balsa Canto y A. Martínez. Optimal design and operation of a wastewater purification system. *Math. Comput. Simul.* 79 (2008), 668-682.
- [2] L. J. Alvarez Vázquez, A. Bermúdez, A. Martínez, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. Application of the optimal control theory to the wastewater elimination problem. *Rev. R. Acad. Ciencias, Serie A: Mat. (RACSAM)* 96 (2002), 283-298.
- [3] L. J. Alvarez Vázquez, N. García Chan, A. Martínez y M. E. Vázquez Méndez. Pareto-optimal solutions for a wastewater treatment problem. Book of abstracts, 4th International Conference on Advanced Computational Methods in Engineering (ACOMEN 2008), Liège, 2008.
- [4] L. J. Alvarez Vázquez, N. García Chan, A. Martínez y M. E. Vázquez Méndez. Management of several purifying plants in the same area: a multi-objective optimal control problem. Book of abstracts, 15th European Conference on Mathematics for Industry (ECMI 2008), Londres, 2008.
- [5] L. J. Alvarez Vázquez, N. García Chan, A. Martínez y M. E. Vázquez Méndez. Multi-objective Pareto-optimal control: an application to wastewater management. *Comput. Optim. Appl.* (en prensa, DOI: 10.1007/s10589-008-9190-9).
- [6] L. J. Alvarez Vázquez, N. García Chan, A. Martínez y M. E. Vázquez Méndez. Pareto-optimal solutions for a wastewater treatment problem. *J. Comput. Appl. Math.* (en prensa, DOI:10.1016/j.cam.2009.08.076).
- [7] L. J. Alvarez Vázquez, A. Martínez, R. Muñoz Sola, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. The water conveyance problem: Optimal purification of polluted waters. *Math. Models Methods Appl. Sci.* 15 (2005), 1393-1416.
- [8] L. J. Alvarez Vázquez, A. Martínez, R. Muñoz Sola, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. Numerical optimization for the purification of polluted shallow waters. *J. Comput. Appl. Math.* 189 (2006), 191-206.

- [9] L. J. Alvarez Vázquez, A. Martínez, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. Numerical convergence for a sewage disposal problem. *Appl. Math. Modelling* 25 (2001), 1015-1024.
- [10] L. J. Alvarez Vázquez, A. Martínez, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. A wastewater treatment problem: study of the numerical convergence. *J. Comput. Appl. Math.* 140 (2002), 27-39.
- [11] L. J. Alvarez Vázquez, A. Martínez, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. Mathematical analysis of the optimal location of wastewater outfalls. *IMA J. Appl. Math.* 67 (2002), 23-39.
- [12] L. J. Alvarez Vázquez, A. Martínez, C. Rodríguez, M. E. Vázquez Méndez. Numerical optimization for the location of wastewater outfalls. *Comput. Optim. Appl.* 22 (2002), 399-417.
- [13] L. J. Alvarez Vázquez, A. Martínez, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. Mathematical model for optimal control in wastewater discharges: The global performance. *C.R. Biologies* 328 (2005), 327-336.
- [14] J. P. Aubin. *Mathematical methods of game and economic theory*. North-Holland, Amsterdam, 1979.
- [15] A. Auslender. Convergence of stationary sequences for variational inequalities with maximal monotone operators. *Appl. Math. Optim.* 28 (1993), 161-172.
- [16] G. M. Bahaa. Optimal control for cooperative parabolic systems governed by Schrödinger operator with control constraints. *IMA J. Math. Control Inform.* 24 (2007), 1-12.
- [17] A. Bermúdez. Numerical modelling of water pollution problems, en *Environment, economics and their mathematical models*, (J. I. Diaz y J. L. Lions, eds.). Masson, Paris, 1994.
- [18] A. Bermúdez, C. Rodríguez y M. A. Vilar. Solving shallow water equations by a mixed implicit finite element method. *IMA J. Num. Anal.* 11 (1991), 79-97.
- [19] E. G. Birgin, J. M. Martínez y M. Raydan. Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets. *SIAM J. Optim.* 10 (2000), 1196-1211.
- [20] M. O. Bristeau, R. Glowinski, B. Mantel, J. Periaux y M. Sefrioui. Genetic algorithms for electro-magnetic backscattering multiobjective optimization, en *Electromagnetic optimization by genetic algorithms* (Y. Rahmat-Samii y E. Michielssen, eds.). J. Wiley, New-York, 1999.

- [21] R. Caballero, L. Rey, F. Ruiz y M. González. An algorithmic package for the resolution and analysis of convex multiple objective problems, en *Multiple criteria decision making* (F. Gunter y T. Gal, eds.). Lecture Notes in Econom. and Math. Systems, vol. 448. Springer Verlag, Berlin, 1997.
- [22] E. Casas. Pontryagin's principle for state constrained boundary control problems of semilinear parabolic equations. *SIAM J. Control Optim.* 35 (1997), 1297-1327.
- [23] J. Cea. *Optimisation theorie et algorithmes*. Dunod, Paris, 1971.
- [24] C. H. Chen y O. L. Mangasarian. Smoothing methods for convex inequalities and linear complementarity problems. *Math. Programming* 71 (1995), 51-69.
- [25] A. Chinchuluun y P. M. Pardalos. A survey of recent developments in multiobjective optimization. *Ann. Oper. Res.* 154 (2007), 29-50.
- [26] F. H. Clarke. *Optimization and nonsmooth analysis*. John Wiley & Sons, New York, 1983.
- [27] C. A. Coello Coello, G. B. Lamont y D. A. Van Veldhuizen. *Evolutionary algorithms for solving multi-objective problems*. Springer Verlag, Berlin, 2007.
- [28] J. L. Cohon y D. H. Marks. A review and evaluation of multiobjective programming techniques. *Water Resource Research* 11 (1975), 208-220.
- [29] I. Das y J. E. Dennis. Normal-boundary intersection: a new method for generating the Pareto surface in nonlinear multicriteria optimization problems. *SIAM J. Optim.* 8 (1998), 631-657.
- [30] C. Daskalakis, P. W. Goldberg y C. H. Papadimitriou. The complexity of computing a Nash equilibrium. *Proceedings 38th Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC'06)*, 71-78, ACM, New York, 2006.
- [31] R. Dautray y J. L. Lions. *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques*. Masson, Paris, 1985.
- [32] J. I. Díaz y J. L. Lions. On the approximate controllability of Stackelberg-Nash strategies, en *Ocean circulation and pollution control - a mathematical and numerical investigation*. Springer Verlag, Berlin, 2004.
- [33] S. P. Dirkse, P. Steven P. y M. C. Ferris. A pathsearch damped Newton method for computing general equilibria. *Ann. Oper. Res.* 68 (1996), 211-232.
- [34] F. Y. Edgeworth. *Mathematical Physics*. Kegan Paul & Co., London, 1881.

- [35] J. Fliege. An efficient interior-point method for convex multicriteria optimization problems. *Math. Operations Research* 31 (2006), 825-845.
- [36] J. Fliege, L. M. Graña Drummond y B. F. Svaiter. Newton's method for multiobjective optimization. *Preprint IMPA* (2008).
- [37] J. Fliege y B. F. Svaiter. Steepest descent methods for multicriteria optimization. *Math. Methods Operations Research* 51 (2000), 479-494.
- [38] S. A. Gabriel y J. S. Pang. An inexact NE/SQP method for solving the nonlinear complementarity problem. *Comput. Optim. Appl.* 1 (1992), 67-91.
- [39] N. García Chan, R. Muñoz Sola y M. E. Vázquez-Méndez. Equilibrio de Nash para un problema de control multiobjetivo relacionado con la depuración de aguas residuales. CD-ROM Proceedings, XX CEDYA / X Congreso de Matemática Aplicada, Sevilla, 2007.
- [40] N. García Chan, R. Muñoz Sola y M. E. Vázquez-Méndez. Nash equilibrium for a multiobjective control problem related to wastewater management. *ESAIM: Control Optim. Calc. Var.* 15 (2009), 117-138.
- [41] S. Gass y T. Saaty. The computational algorithm for the parametric objective function. *Nav. Res. Logist.*, 2 (1955), 39-45.
- [42] R. Gibbons. *A primer in game theory*. Harvester-Wheatsheaf, New York, 1992.
- [43] L. M. Graña Drummond y A. N. Iusem. A projected gradient method for vector optimization problems. *Comput. Optim. Appl.* 28 (2004), 5-29.
- [44] M. D. Gunzburger. *Perspectives in flow control and optimization*. Advances in Design and Control, vol. 5. SIAM, Philadelphia, 2003.
- [45] P. T. Harker y B. Xiao. Baichun Newton's method for the nonlinear complementarity problem: a B-differentiable equation approach. *Math. Programming* 48 (1990), 339-357.
- [46] B. W. C. Heermann y J. Fliege. A new adaptative algorithm for convex quadratic multicriteria optimization, en *Practical approaches to multi-objective optimization* (J. Branke y K. Miettinen, eds.). Dagstuhl Seminar Proceedings, Germany, 2005.
- [47] M. Kohne, M. Schuhen, y D. Schonberger. Modelling and Simulation of Purification Processes in Wastewater Treatment Plants Using the Modular Toolbox KSIM. *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems* 5 (1999), 285-297.
- [48] M. Kojima, T. Noma, Toshihito y A. Yoshise. Global convergence in infeasible-interior-point algorithms. *Math. Programming* 65 (1994), 43-72.

- [49] O. A. Ladyzenskaja, V. A. Solonnikov y N. N. Ural'ceva. *Linear and quasilinear equations of parabolic type*. Translations of Mathematical Monographs, vol. 23. Amer. Math. Soc., Providence, 1968.
- [50] M. Laumanns, L. Thiele, K. Deb y E. Zitzler. Combining convergence and diversity in evolutionary multiobjective optimization. *Evolutionary Comput.* 10 (2002), 263-282.
- [51] C. Lindeborg, N. Wiberg, N. y A. Seyf. Studies of the dynamic behaviour of a primary sedimentation tank. *Water Science and Technology* 34 (1996), 213-222.
- [52] J. L. Lions. *Contrôle optimal des systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles*. Dunod, Paris, 1968.
- [53] J. L. Lions. Contrôle de Pareto de systèmes distribués. Le cas stationnaire. *C. R. Acad. Sci. Paris, Serie I*, 302 (1986), 223-227.
- [54] J. L. Lions. Contrôle de Pareto de systèmes distribués. Le cas d'évolution. *C. R. Acad. Sci. Paris, Serie I*, 302 (1986), 413-417.
- [55] J. L. Lions. Some remarks on Stackelberg's optimization. *Math. Models Methods Appl. Sci.* 4 (1994), 477-487.
- [56] J. L. Lions y E. Magenes. *Problèmes aux limites non homogènes et applications*. Dunod, Paris, 1968.
- [57] O. L. Mangasarian. Equivalence of the complementarity problem to a system of nonlinear equations. *SIAM J. Appl. Math.* 31 (1976), 89-92.
- [58] R. T. Marler y J. S. Arora. Survey of multi-objective optimization methods for engineering. *Struct. Multidisc. Optim.* 26 (2004) 369-395.
- [59] A. Martínez, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. A control problem related to wastewater treatment. *C. R. Acad. Sci. Paris, Serie I*, 328 (1999), 35-40.
- [60] A. Martínez, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. Theoretical and numerical analysis of an optimal control problem related to wastewater treatment. *SIAM J. Control Optim.* 38 (2000) 1535-1553.
- [61] A. Martínez, C. Rodríguez y M. E. Vázquez Méndez. A control problem arising in the process of waste water purification. *J. Comput. Appl. Math.* 115 (2000) 67-79.
- [62] K. Miettinen. *Nonlinear multiobjective optimization*. Kluwer International Series, 1998.

- [63] K. Miettinen. Interactive nonlinear multiobjective procedures, en *Multiple criteria optimization: State of the art annotated bibliographic surveys* (M. Ehrgott y X. Gandibleux, eds.). Kluwer Academic Publishers, Boston, 2002.
- [64] P. Morris. *Introduction to game theory*. Springer Verlag, Berlin, 1994.
- [65] J. F. Nash. Non-cooperative games. *Ann. Math.* 54 (1951), 286-295.
- [66] V. Pareto. *Cours d'Economie Politique*, vol. I y II. Rouge, Lausanne, 1896.
- [67] N. G. Pavlidis, K. E. Parsopoulos y M. N. Vrahatis. Computing Nash equilibria through computational intelligence methods. *J. Comput. Appl. Math.* 175 (2005), 113-136.
- [68] O. Pironneau. *Finite element methods for fluids*. Wiley, Chichester, 1989.
- [69] O. Pironneau. On the transport-diffusion algorithm and its applications to the Navier-Stokes equations. *Numer. Math.* 38 (1982), 309-332.
- [70] A. M. Ramos, R. Glowinski y J. Periaux. Nash equilibria for the multiobjective control of linear partial differential equations. *J. Optim. Theory Appl.* 112 (2002), 457-498.
- [71] A. M. Ramos, R. Glowinski y J. Periaux. Pointwise control of the Burgers equation and related Nash equilibrium problems: computational approach. *J. Optim. Theory Appl.* 112 (2002), 499-516.
- [72] A. M. Ramos y T. Roubicek. Nash equilibria in noncooperative predator-prey games. *Appl. Math. Optim.* 56 (2007), 211-241.
- [73] A. Rivas y E. Ayesa. Optimum design of activated sludge plants using the simulator daisy 2.0, en: Proceedings de *International Conference on Measurements and Modelling in Environmental Pollution* (MMEP), 507-516, 1997.
- [74] S. Sayin. Measuring the quality of discrete representations of efficient sets in multiple objective mathematical programming. *Math. Program.* 87 (2000), 543-560.
- [75] J. D. Schaffer. Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms, en *Proceedings of the First International Conference on Genetic Algorithms*. Laurence Erlbaum, 1985.
- [76] P. Sen y J. B. Yang. *Multiple criteria decision support in engineering design*. Springer Verlag, Berlin, 1998.
- [77] H. von Stackelberg. *The theory of market economy*. Oxford University Press, Oxford, 1952.

- [78] Z. Tang, J. A. Désidéri y J. Periaux. Multicriterion aerodynamic shape design optimization and inverse problems using control theory and Nash games. *J. Optim. Theory Appl.* 135 (2007), 599-622.
- [79] M. E. Vázquez Méndez. *Análisis y control óptimo de problemas relacionados con la dispersión de contaminantes*. Tesis Doctoral, Universidad de Santiago de Compostela, 1999.
- [80] L. Yang, B. Lin, S. M. Kashefipour y R. A. Falconer. Integration of a 1-D river model with object-oriented methodology. *Environmental Modelling and Software* 17 (2002), 693-701.
- [81] L. Zadeh. Optimality and non-scalar-valued performance criteria. *IEEE Trans. Autom. Control* 8 (1963), 59-60.