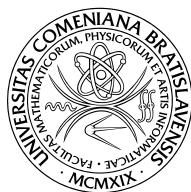




Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzity Komenského v Bratislave



Mgr. Hana Budáčová

Autoreferát dizertačnej práce

**Solution of direct and inverse problems in infiltration
and contaminant transport in porous media under
centrifugation**

(Riešenie priamych a inverzných úloh pre infiltráciu a transport
kontaminantu v pórovitom prostredí počas centrifugácie)

na získanie vedecko-akademickej hodnosti philosophiæ doctor
v odbore doktorandského štúdia:

9.1.5 Numerická analýza a vedecko-technické výpočty

Bratislava 2012

Dizertačná práca bola vypracovaná v dennej forme doktorandského štúdia na Katedre matematickej analýzy a numerickej matematiky, Fakulty matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave.

Predkladateľ: Mgr. Hana Budáčová
KMANM, FMFI UK
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Školiteľ: Prof. RNDr. Jozef Kačur, DrSc.
KMANM, FMFI UK
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Oponenti: Prof. RNDr. Igor Bock, PhD
Fakulta elektrotechniky a informatiky, STU
Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Marianna Remešíková, PhD.
Stavebná fakulta, STU
Radlinského 11, 813 68 Bratislava

Prof. RNDr. Ján Filo, CSc.
KMANM, FMFI UK
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Obhajoba dizertačnej práce sa koná dňa o h.
pred komisiou pre obhajobu dizertačnej práce v odbore doktorandského štúdia vymenovanou predsedom odborovej komisie dňa

v študijnom odbore 9.1.5 Numerická analýza a vedecko-technické výpočty

na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky UK, Mlynská dolina, miestnosť ...

Predseda odborovej komisie:
Prof. RNDr. Michal Fečkan, DrSc.
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzity Komenského
Mlynská dolina
842 48 Bratislava

1 Úvod

V tejto práci sa zaoberáme tokom kvapalín v pórovitom prostredí. Pod pórovitým prostredím si pre začiatok predstavme niečo ako špongiu, prípadne piesok či štrk, kvapalinu pre jednoduchosť považujme za vodu. Pôsobením napríklad gravitačnej sily a sacej schopnosti nenasýteného prostredia má voda tendenciu cez takéto prostredie pretekať, pričom nás zaujíma, ako tento proces bude prebiehať. Dôvody, ktoré nás vedú k skúmaniu tejto problematiky sú hlavne ekologické. Kedy sa voda, ktorá práve napršala dostane až k podzemnej vode? Koľko kontaminantu, ktorý je v nej rozpustený sa dostane k zdrojom pitnej vody a ako veľmi ju znečistí? Toto všetko a ešte omnoho viac problémov sa vyskytuje vo viacerých oblastiach vedy aj každodenného života.

Vytváraním modelov, ktoré dostatočne popisujú tieto zložité procesy sa už niekoľko desaťročí zaoberá časť vedeckej komunity. Prvým fyzikom, ktorý v roku 1856 empiricky sformuloval zákon, ktorým sa riadi tok vody v plne saturovanom zvislom stĺpci piesku bol Henry Darcy.

Pri modelovaní toku v čiastočne nasýtenom prostredí bolo potrebné nájsť vzťah medzi sacou silou a mierou nasýtenia vzorky. V tejto práci používame vzťahy, ktoré empiricky objavil Van Genuchten [2]. Objavujú sa v nich dva parametre, ktoré súvisia s konkrétnym prostredím a bez ktorých naše modely nevieme použiť. Jedným z hlavných cieľov tejto práce je určovanie týchto parametrov.

Ako prví vzťahy medzi sacími vlastnosťami a mierou saturácie pomocou centrifúgy odmerali Hassler s Brunnerom v práci [4]. V práci [6] nájdeme pekný prehľad techník, ktoré sa dovtedy používali na meranie už spomínaných parametrov. V [7] boli použité elektródy inštalované vo vnútri vzorky, ktoré vysielali elektrické signály, na základe ktorých sa potom autori snažili rekonštruovať pôvodné parametre.

Táto práca nadväzuje na tieto myšlienky a prichádza s novými metódami numerického modelovania a možnosťou používať k určovaniu parametrov iba neinvazívne merania. Navrhujeme upraviť centrifúgu tak, aby dokázala signalizovať, kedy rotujúca vzorka dosiahne určitú predpísanú veľkosť rotačného momentu. Počas rotácie teda budeme merať iba čas, kedy táto situácia nastane. Takisto budeme potrebovať merať objem natečenej vody do vzorky, resp. vytečenej vody zo vzorky. Pomocou našich numerických algoritmov sme schopní len na základe týchto informácií žiadané parametre určiť.

2 Základné pojmy a modely

Začneme tým, že si ujasníme niekoľko základných pojmov (pár z nich už bolo letmo spomenutých v úvode).

Pórovité prostredie sa vyznačuje tým, že obsahuje tuhé časti aj medzery, pričom predpokladáme, že sú rozmiestnené v istom zmysle rovnomerne. V tejto práci sa na veci pozeráme makroskopickým pohľadom, to znamená neberieme do úvahy konkrétne tvary a veľkosti medzierok, ani konkrétnu štruktúru pevných častí, ale len "priemerné vlastnosti" materiálu ako celku.

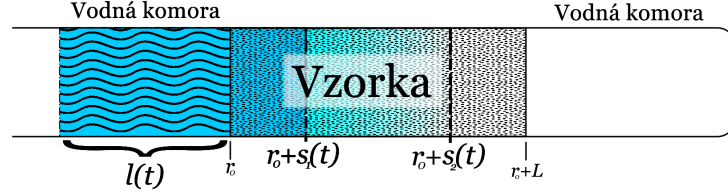
Veličina, ktorá nám určuje, koľko vody sa nachádza v jednotkovom objeme pórovitého materiálu sa nazýva saturácia a označuje θ . Saturácia je určite menšia ako porozita ϕ , ktorá vyjadruje objem medzierok v jednotkovom objeme materiálu. V praxi však často ostáva aj po naplnení materiálu kvapalinou v medzierkach zbytkový vzduch, teda maximálna možná saturácia je označená θ_s a je menšia ako porozita. Taktiež existuje minimálna saturácia, ktorá sa zvykne nazývať reziduálna saturácia a označovať θ_r . Môže byť rovná nule, ale väčšinou je väčšia, pretože po vysušení vzorky v nej zvykne ostať zbytkové množstvo kvapaliny. V ďalšom texte budeme používať aj pojem efektívna saturácia, ktorá je označená u a je definovaná vzťahom $u = (\theta - \theta_r)/(\theta_s - \theta_r)$.

Konkrétna vzorka pórovitého materiálu teda môže byť buď saturovaná (vtedy je $u = 1$), alebo čiastočne saturovaná ($u \in (0, 1)$), alebo suchá ($u = 0$). V saturovanej oblasti môžeme tok kvapaliny modelovať prostredníctvom Darcyho zákona. V čiastočne saturovanej oblasti sa tok riadi Richardsovou rovnicou, ktorá je nelineárna a obsahuje singularitu. V nami skúmaných situáciách bude vzorka obsahovať rôzne oblasti, ktoré budú rôzne saturované až suché. Situáciu skomplikuje prítomnosť rozhraní medzi týmito oblasťami a ich pohyb v čase.

Tretia veličina, ktorá popisuje vlastnosti plne alebo čiastočne saturovanej vzorky sa nazýva piezometrický tlak, ktorý meriame výškou h vodného stĺpca. Môžeme si tento tlak predstaviť ako chuť danej látky nasávať kvapalinu z vonku. V ďalšom texte tento pojem používame ešte v širšom kontexte; pri saturovanej vzorke kladnou hodnotou h označujeme tlak kvapaliny, pri čiastočne saturovanej vzorke záporná hodnota h vyjadruje saciu silu nenасыteného prostredia. Ako bolo spomínané v úvode, vzťah medzi h a u bol prvýkrát empiricky zistený v [2] a môžeme ho vyjadriť nasledovne:

$$u = \left(\frac{1}{1 + (\gamma h)^n} \right)^m, \quad (1)$$

kde $m = 1 - 1/n$; $m, n > 0$, a $\gamma < 0$ sú parametre, ktoré charakterizujú vlastnosti materiálu a tiež boli spomínané v úvode.



Obr. 1: Obrázok vzorky počas centrifugácie.

2.1 Model toku kvapalín počas centrifugácie

Najviac pozornosti v tejto práci venujeme modelu toku kvapaliny do pórovitej vzorky počas centrifugácie. Centrifúgu používame na to, aby sme mohli pomocou vysokej odstredivej sily urýchliť inak dlho trvajúce experimenty.

Predstavme si, že na centrifúgu pripevníme vo vzdialenosti r_0 od stredu jednorozmernú vzorku dĺžky L . Situácie je ilustrovaná na obrázku 1. Vzdialenosť od stredu centrifúgy budeme označovať r . Na začiatku a na konci vzorky sú umiestnené nádržky s vodou, pričom prvá je na začiatku experimentu naplnená vodou (vývoj množstva vody v nej budeme označovať $l(t)$) a druhá je prázdna a slúži na zbieranie vody. Experiment začneme so suchou vzorkou. Hneď po roztočení centrifúgy je voda vťahovaná sacou silou suchej vzorky a tlačaná odstredivou silou smerom od stredu centrifúgy. Vo vzorke vzniknú tri oblasti oddelené dvomi rozhraniami.

Prvá oblasť bude plne saturovaná, kde bude platiť $h > 0$ pričom od čiastočne saturovanej oblasti bude oddelená rozhraním, ktoré nazveme saturovaný front. Pohyb tohto frontu bude popisovať funkcia $s_1(t)$. Na tejto oblasti bude pohyb kvapaliny opisovať Darcyho rovnica

$$K_s \partial_r \left(\partial_r h - \frac{\omega^2}{g} r \right) = 0, \quad \text{pre } r \in (r_0, r_0 + s_1(t)), \quad (2)$$

kde K_s je hydraulická konduktivita (konštanta charakterizujúca vlastnosti vzorky aj kvapaliny), ω je uhlová rýchlosť a g je gravitačná konštanta.

Druhá oblasť bude čiastočne saturovaná, teda bude platiť $h < 0$. Od plne saturovanej oblasti je oddelená saturovaným frontom a od suchej oblasti bude oddelená rozhraním, ktoré nazveme suchý front. Pohyb tohto frontu bude popisovať funkcia $s_2(t)$, ktorú špecifikujeme neskôr. Tok kvapaliny v tejto oblasti vieme modelovať pomocou Richardsovej rovnice

$$\partial_t \theta = \partial_r \left(K_s k(u) \left(\partial_r h - \frac{\omega^2}{g} r \right) \right) \quad \text{pre } r \in (r_0 + s_1(t), r_0 + s_2(t)). \quad (3)$$

Člen $K_s k(u)$ popisuje hydraulickú konduktivitu v čiastočne saturovanej oblasti (resp. permeabilitu), ktorá nie je konštantná, ako tomu bolo pri plne saturovanej oblasti. Nelineárny člen $k(u)$ bol empiricky zistený Van Genuchtenom a vieme ho vyjadriť ako

$$k(u) = u^{\frac{1}{2}} \left(1 - \left(1 - u^{\frac{1}{m}} \right)^m \right)^2, \quad (4)$$

kde m, n, γ sú tie isté parametre ako v (1).

2.2 Transport a disperzia kontaminantu

V praxi nás často zaujíma nielen tok kvapaliny, ale aj pohyb kontaminantu, ktorý je v danej kvapaline rozpustený. Drobné čiastočky kontaminantu sa presúvajú v smere toku kvapaliny a tiež v smere nižšej koncentrácie kontaminantu. Keď označíme w koncentráciu kontaminantu v kvapaline, dané princípy nám modeluje rovnica

$$\partial_t(\theta w) = -\operatorname{div} J = -\operatorname{div}(\theta v w - \theta \mathbf{D} \nabla w),$$

kde J je tok kontaminantu (množstvo kontaminantu, ktoré prejde cez jednotkovú plochu za jednotkový čas). Tento tok je v skutočnosti súčtom dvoch rôznych čiastočných tokov, a to advektívneho a disperzného toku. Advektívny tok, ktorý popisuje už spomínaný pohyb čiastočiek v smere toku kvapaliny, je daný súčinom rýchlosti kvapaliny v a množstvom kontaminantu v jednotkovom objeme θw . Disperzný tok sa odohráva v smere záporného gradientu koncentrácie, pričom \mathbf{D} je koeficient proporcionality.

3 Ciele dizertačnej práce

- Vyvinúť a popísať matematický model, pomocou ktorého vieme modelovať tok kvapaliny pri natekaní do suchého prostredia a pri vytekaní z plne nasýteného pórovitého prostredia počas centrifugácie.
- Nájsť numerickú metódu, ktorá dokáže vývoj toku kvapaliny pre tento model efektívne a presne spočítať.
- Použiť túto numerickú metódu na riešenie inverznej úlohy s cieľom určiť parametre charakterizujúce vlastnosti pórovitých materiálov.
- Preskúmať rôzne vstupné dáta, ktoré sa dajú získať neinvazívnymi meraniami (zmena ťažiska, rotačného momentu, množstva vody v nádržkách, pohyb suchého frontu). Zistiť pri akom množstve ktorých dát je rekonštrukcia parametrov čo najpresnejšia.

- Podoprieť použitie danej numerickej schémy teoretickými výsledkami.
- V prípade toku kvapalín spolu s transportom kontaminantu aproximovať presné riešenie postupnosťou približných riešení, ktoré získame diskretizáciou priestorovej premennej a zmenou pôvodného systému na systém ODR. Pomocou apriórnych odhadov dokázať existenciu slabého riešenia.
- Dokázať konvergenciu k slabému riešeniu pre dané približné riešenia.

4 Numerické výsledky

V tejto časti si najprv predstavíme konkrétny model a jeho numerickú aproximáciu. Potom si ukážeme niekoľko numerických experimentov.

4.1 Matematický model

Z Richardsovej rovnice sa pomocou transformácie na pevnú oblasť $(0, 1)$, ktorú vieme zapísať $x = (r - r_0 - s_1(t))/(s_2(t) - s_1(t))$ stane rovnica

$$u_t = \frac{K_s}{(\theta_s - \theta_r)S_{21}^2} \left(D(u)u_x - Sk(u)\frac{\omega^2}{g}(r_0 + s_1 + xS) \right)_x + \frac{1}{S}(\dot{s}_1(1-x) + \dot{s}_2x)u_x, \quad (5)$$

pričom S označuje $s_2(t) - s_1(t)$. Počiatočné a okrajové podmienky sú

$$u(0, t) = 1, \quad u(1, t) = 0, \quad u(x, 0) = \tilde{u}_0(x).$$

Integrovaním Darcyho rovnice vieme získať vyjadrenie pre h v plne saturovanej oblasti. Použitím faktu, že tok je v celej plne saturovanej oblasti konštantný a že sa rovná zápornej zmene množstva kvapaliny v prednej nádobe dostaneme rovnicu

$$\dot{l}(t) = -K_s \frac{\omega^2}{2gs_1(t)} \left(2r_0s_1(t) + s_1(t)^2 + l(t)(2r_0 - l(t)) \right). \quad (6)$$

V prácach [3] a [5] môžeme čerpať informácie, ktoré vieme použiť pri zisťovaní správania pohybu suchého frontu. Získame rovnicu

$$\dot{s}_2(t) = \frac{-K_s m^2}{p(\theta_s - \theta_r)\gamma(n-1)(s_2(t) - s_1(t))} \partial_x u(1, t)^p, \quad \text{kde } p = \frac{1}{2} + \frac{1}{m}. \quad (7)$$

Pohyb saturovaného frontu určíme pomocou zákona zachovania, inými slovami, že množstvo kvapaliny v systéme $M(t)$ je stále konštantné a vieme ho vyjadriť ako

$$M(t) = \underbrace{l(t)}_{\text{komora}} + \underbrace{(\theta_s - \theta_r)s_1(t)}_{\text{sat. obl.}} + \underbrace{(\theta_s - \theta_r) \int_{r_0+s_1(t)}^{r_0+s_2(t)} u(r, t) dr}_{\text{nesat. obl.}} = C. \quad (8)$$

4.2 Diskretizácia

Na získanie numerického modelu potrebujeme najprv diskretizovať premennú x

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1,$$

pričom veľkosť intervalu (x_{i-1}, x_i) označíme α_i . Hodnotu približného riešenia v bode x_i na intervale $(0, T)$ označuje funkcia

$$u_i(t) := u(x_i, t).$$

Priestorové derivácie nahradíme pomocou diferencií

$$\begin{aligned} \partial_x u(x, t)|_{x=x_{i+1/2}} &\approx \frac{u_{i+1}(t) - u_i(t)}{\alpha_{i+1}} := \partial_x u_i^+, \\ \partial_x u(x, t)|_{x=x_{i-1/2}} &\approx \frac{u_i(t) - u_{i-1}(t)}{\alpha_i} := \partial_x u_i^-. \end{aligned}$$

Budeme potrebovať aj hodnoty v polovičných bodoch $D(u(x_{i-1/2})) = D_{i-1/2}$ a $k(u(x_{i-1/2})) = k_{i-1/2}$ pre $i = 1, \dots, N$. Rovnicu (5) potom aproximujeme pomocou systému $N - 1$ obyčajných diferenciálnych rovníc

$$\begin{aligned} \dot{u}_i &= \frac{2K_s}{(\alpha_i + \alpha_{i+1})(\theta_s - \theta_r)S^2} \left[D_{i+1/2} \partial_x u_i^+ - D_{i-1/2} \partial_x u_i^- - \right. \\ &\quad \left. - S \frac{\omega^2}{g} (k_{i+1/2}(r_0 + s_1 + x_{i+1/2}S) - k_{i-1/2}(r_0 + s_1 + x_{i-1/2}S)) \right] + \\ &\quad + \frac{1}{S} (\dot{s}_1(1 - x_i) + \dot{s}_2 x_i) \partial_x L_i(x) \Big|_{x=x_i}, \end{aligned} \quad (9)$$

kde $L_i(x)$ označuje deriváciu Lagrangeovho polynómu prechádzajúceho hodnotami (x_{i-1}, u_{i-1}) , (x_i, u_i) a (x_{i+1}, u_{i+1}) .

Rovnicu (6) vieme schematicky zapísať

$$\dot{l}(t) = -q(t) := f_1(l(t), s_1(t)),$$

čo vlastne vyjadruje, že pravá strana je nejakou funkciou premenných $l(t)$ a $s_1(t)$.

Rovnicu (7) aproximujeme

$$\begin{aligned}\dot{s}_2(t) &\approx \frac{-K_s m^2}{p(\theta_s - \theta_r)\gamma(n-1)(s_2(t) - s_1(t))} \left(\partial_x L_{N-1}(x)\Big|_{x=1}\right)^p \\ &:= f_3(s_1, s_2, u_{N-2}, u_{N-1}) \quad ,\end{aligned}$$

pričom člen $\partial_x u(1, t)^p$ odhadneme pomocou derivácie Lagrangeovho polynómu, ktorý prechádza bodmi (x_{N-2}, u_{N-2}) , (x_{N-1}, u_{N-1}) a $(x_N, 0)$.

V rovnici vyjadrujúcej zachovanie množstva kvapaliny (8) nahradíme integrál sumou a dostaneme

$$l(t) + s_1(t)(\theta_s - \theta_r) + (s_2(t) - s_1(t))(\theta_s - \theta_r) \left(\frac{\alpha_1}{2} + \sum_1^{N-1} u_i(t) \frac{\alpha_{i+1} + \alpha_i}{2}\right) = C.$$

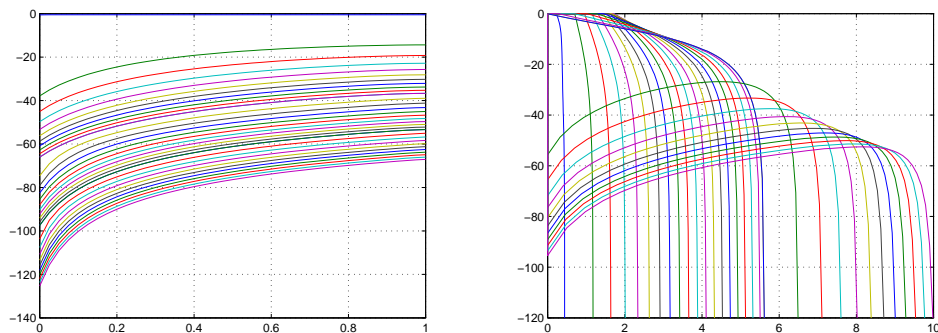
Tieto rovnice spoločne nám dávajú systém $N + 1$ obyčajných diferenciálnych rovníc a jednej algebraickej podmienky. Riešime ho v softvéri Matlab pomocou solvera ode15s.

4.3 Ukážka experimentov

Prvá časť numerických experimentov v práci je venovaná toku kvapaliny z úplne nasýtenej vzorky, druhá časť je venovaná toku kvapaliny do suchej vzorky (vyššie spomínaný model). V prvej časti je situácia jednoduchšia, začíname s úplne saturovanou vzorkou a pomocou rotácie vodu vytlačíme zo vzorky preč. V našom konkrétnom modeli dvakrát počas experimentu zvýšime rýchlosť rotácie.

Pre ilustráciu sú na obrázku 2 nakreslené hodnoty piezometrického tlaku v rôznych časových úsekoch rovnomerne rozmiestnených v intervale $(0, 15\,000)$ pri prvej situácii a v intervale $(0, 9\,000)$ v druhej situácii. Každá krivka znázorňuje graf veľkosti piezometrického tlaku v danom čase, čím väčší piezometrický tlak, tým vyššia efektívna saturácia. V prvom prípade sme na x -ovú os naniesli transformované hodnoty, v druhom prípade sme urobili inverznú transformáciu, lebo tu dochádza k pohybu frontov. Dĺžka vzorky v experimentoch bola 10cm.

Hlavným cieľom našich experimentov je riešiť inverznú úlohu. V oboch situáciách sa jednoducho dajú merať množstvo natečenej vody do vzorky a vytečenej vody zo vzorky, a tiež čas, kedy daná vzorka dosiahne predpísanú veľkosť rotačného momentu.



Obr. 2: Každá krivka znázorňuje piezometrický tlak v inom čase medzi 0 až 15 000s resp. 0 až 9 000s.

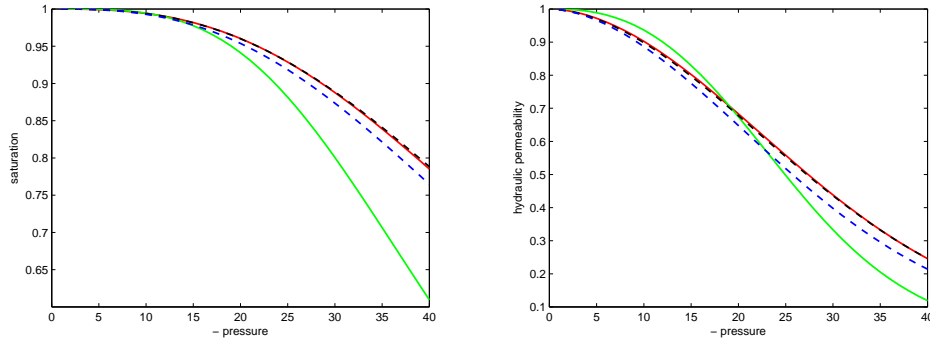
Ako sme postupovali? Najprv sme si určili východziu hodnotu parametrov, teda určili $\gamma = -0.0189$ a $n = 2.81$ (tieto údaje zodpovedajú pieskovitej zemine). Určili sme si dáta, ktoré by sme chceli merať, ako napríklad množstvo vytečenej vody každých 100 sekúnd. Pomocou numerického programu sme vypočítali tieto dáta a uložili ich. Potom sme akoby "zabudli" parametre γ a n , zvolili si nejaký počiatočný bod (ktorý označujeme γ_0 a n_0) a zistili, aké hodnoty dát by nám vyšli pri týchto parametroch. Výsledky sme porovnali a podľa toho sa posunuli niektorým smerom od γ_0 a n_0 . Metóda, ktorú sme na toto iterovanie použili, sa volá Levenberg-Marquardtova (LM) metóda.

V tabuľke 1 môžeme vidieť, ako dopadol spomínaný iteračný proces pri experimentoch s vytekaním z plne saturovanej oblasti. Vidíme tam počiatočné hodnoty parametrov, počet iterácií, čas potrebný na beh programu a výsledky. V tomto experimente boli ako dáta použité časy, kedy sa nadobudnú predpísané rotačné momenty a objem vytečenej vody.

$100\gamma_0$	n_0	Poč. iter.	Čas	$100\gamma_f$	n_f
-0.7	1.7	8	38.59	-1.8899982855	2.8100000016
-1	3.8	12	69.39	-1.8899990924	2.8100000921
-3	4	17	104.95	-1.8900022565	2.8100009647
-3	2.1	9	44.59	-1.8899998682	2.8100001176

Tabuľka 1: Výsledky LM iteračného procesu pre dané počiatočné hodnoty.

Obrázok 3 a tabuľka 2 sú dva rôzne spôsoby, ako znázorniť konvergenciu iteračného procesu k správneému riešeniu. Obe sa vzťahujú ku komplikovanejšej situácii, t.j. k vtekaniu vody do suchej vzorky. V tomto prípade začíname



Obr. 3: Vzťah medzi piezometrickým tlakom a efektívnou saturáciou a medzi piezometrickým tlakom a permeabilitou.

s hodnotou $100\gamma_0 = -2.5$ a $n_0 = 3.5$. Na obrázku sú znázornené krivky, ktoré sú definované pomocou Van Genuchtenových vzťahov (1) a (4).

Zelená krivka zodpovedá počiatkovej hodnote parametrov γ_0 a n_0 . Červenou krivkou je znázornené presné riešenie. Modrou čiarkovanou sme znázornili riešenie dosiahnuté iteračným procesom, kde sme ako dáta použili iba časy, kedy nastali predpísané rotačné momenty a množstvo vtečenej vody. Ukazuje sa, že presnejšie riešenie vieme získať, ak použijeme aj informácie o pohybe suchého frontu s_2 .

V tabuľke 2 máme okrem porovnania riešenia získaného LM metódou s pomocou a bez pomoci s_2 aj ukázané, čo sa stane s riešením v prípade pridaného šumu.

	bez s_2		s s_2	
počiatočné hodnoty	$-100\gamma_0 = -2.5$	$n=3.5$	$-100\gamma_0 = -2.5$	$n=3.5$
presné hodnoty	-1.89	2.81	-1.89	2.81
bez šumu	-1.9766	2.7639	-1.8757	2.7764
pridaný šum (0.5s)	-1.9805	2.7632	-1.8763	2.7766
pridaný šum (1s)	-1.9774	2.7638	-1.8763	2.7768

Tabuľka 2: Porovnanie riešení získaných s pomocou a bez pomoci s_2 a bez alebo s pridaným šumom.

5 Teoretické výsledky

V teoretickej časti sme upravili model používaný v numerickej časti a pridali rovnicu opisujúcu transport kontaminantu. V modeli je prítomné iba jedno rozhranie medzi čiastočne saturovaným a suchým prostredím $s(t)$, pričom okrajové podmienky sú Dirichletove. Túto úlohu riešime na intervale $(0, 1)$ v čase $(0, T)$.

Rovnice, ktoré popisujú tento model vieme zapísať

$$\partial_t u = \frac{1}{s(t)^2} \partial_x [\partial_x z(u) - s(t)k(u)] + \frac{\dot{s}(t)}{s(t)} x \partial_x u, \quad (10)$$

$$0 = \theta \partial_t w - \frac{\dot{s}(t)}{s(t)} \theta x \partial_x w + \frac{1}{s(t)} (\theta v) \partial_x w - \frac{1}{s^2(t)} \partial_x (\theta \mathbf{D} \partial_x w), \quad (11)$$

s počiatočnými a okrajovými podmienkami

$$\begin{aligned} u(0, t) &= 1 - \epsilon, & u(1, t) &= 0, & u(x, 0) &= u_0(x), \\ w(0, t) &= 1, & z(1, t) &= 0, & w(x, 0) &= w_0(x). \end{aligned}$$

Daný problém diskretizujeme v priestorovej premennej, pričom veľkosť kroku bude konštantne h a označíme $x_i := ih$, $u_i(t) := u(x_i, t)$. Symbolom δ označíme priestorové diferencie. Dostaneme systém ODR:

$$\begin{aligned} \dot{u}_i(t) &= \frac{1}{hs(t)^2} (\delta z_{i+1} - \delta z_i) - \frac{1}{hs(t)} (k(u_i) - k(u_{i-1})) + \frac{\dot{s}(t)}{s(t)} \delta u_{i+1}(ih), \\ \theta_i \dot{w}_i(t) &= \frac{\dot{s}(t)}{s(t)} \theta_{i+1} x_{i+1} \delta w_{i+1} - \frac{1}{s(t)} \theta_i v_i \delta w_i + \frac{1}{s(t)^2} \delta (\theta_{i+1} \mathbf{D}_{i+1} \delta w_{i+1}) \end{aligned} \quad (12)$$

pre $i = 1, \dots, N-1$. Pôvodné počiatočné a okrajové podmienky interpretujeme ako

$$\begin{aligned} u_0(t) &= 1 - \epsilon, & u_N(t) &= 0, & u_i(0) &= \tilde{u}_0(x_i), \\ w_0(t) &= 1, & w_N(t) &= 0, & w_i(0) &= \tilde{w}_0(x_i), \end{aligned}$$

pre $i = 1, \dots, N-1$.

5.1 Apriórne odhady

V práci sme v niekoľkých lemach dokázali platnosť nasledovných apriórnych odhadov:

- Pre hodnoty $u_i(t)$ a $w_i(t)$ získané riešením diskretizovaného systému (12) platia nasledujúce odhady:

$$\begin{aligned} u_i(t) &\leq 1 - \epsilon & u_i(t) &\geq 0, \\ w_i(t) &\leq 1 & w_i(t) &\geq 0. \end{aligned}$$

- Pre priestorové diferencie platí:

$$h \sum_{i=1}^N \int_0^T (\delta u_i(t))^2 dt \leq C, \quad h \sum_{i=1}^N \int_0^T (\theta_i(t) \delta w_i(t))^2 dt \leq C,$$

- Pre časové derivácie platí:

$$h \int_0^T \sum_{i=1}^{N-1} (\dot{u}_i(t))^2 dt \leq C,$$

$$h \int_0^{T-y} \sum_{i=1}^{N-1} ((\theta_i(t+y))^2 w_i(t+y) - (\theta_i(t))^2 w_i(t))^2 dt \leq Cy,$$

pre každé $0 < y < T$. Vo všetkých odhadoch je C konštanta nezávislá na priestorovom delení.

5.2 Konvergencia k slabému riešeniu

Definujme približné riešenia u^N a w^N nasledovne:

$$u^N(x, t) := u_{i-1}(t) \frac{x_i - x}{h} + u_i(t) \frac{x - x_{i-1}}{h},$$

$$w^N(x, t) := w_{i-1}(t) \frac{x_i - x}{h} + w_i(t) \frac{x - x_{i-1}}{h},$$

pre $x \in (x_{i-1}, x_i]$.

Použitím vyššie spomenutých apriórnych odhadov sme postupne dokázali nasledovné tvrdenia:

- Existuje podpostupnosť $\{u^n(t)\}_{n=1}^\infty$, ktorá konverguje v $L^2(I, L^2)$ k funkcii u .
- Funkcia u je slabým riešením (10).
- Postupnosť $\{u^n(t)\}_{n=1}^\infty$ konverguje k u v $L^2(I, H_0^1)$.
- Existuje podpostupnosť $\{w^n(t)\}_{n=1}^\infty$, ktorá konverguje v $L^2(I, L^2)$ k funkcii w .
- Funkcia w je slabým riešením (11).

6 Zoznam literatúry

- [1] J. Bear and A. Cheng. Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport. D.Reidel Publishing Company 1987, ISBN 1-55608-015-8.
- [2] M. Th. van Genuchten. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci.Soc.Am. J.*, 44:1511–1521,1971.
- [3] D. Constaes and J. Kačur. Determination of soil parameters via the solution of inverse problems in infiltration. *Computational Geosciences*, 5:25–46, 2004.
- [4] G.L. Hassler and E. Brunner. Measurements of capillary pressure in small core samples. *Trans.AIME*, 160:114–123, 1945.
- [5] G .Kačurová. Numerical modelling of convection-diffusion-reaction problems with free boundary in 1d. <http://arxiv.org/abs/0909.0363>. to appear.
- [6] R.J. Nimmo and K.A. Mello. Centrifugal techniques for measuring saturated hydraulic conductivity. *Water Resour. Res.*, 27(6):1263–1269, 1991.
- [7] J. Šimůnek and J.R. Nimmo. Estimating soil hydraulic parameters from transient flow experiments in a centrifuge using parameter optimization technique. *Water Resour. Res.*, 41, 2005.
- [8] B.Malengier. On numerical methods for direct and inverse convection-diffusion problems. *PhD Thesis*,2006.
- [9] E.Trojáková. Numerical modelling of convection diffusion reaction. *PhD Thesis*,2011.
- [10] J. Kačur, B. Malengier, and P. Kišon. A numerical model of transient unsaturated flow under centrifugation based on mass balance. *Transport in Porous Media*, 87(3):793–813 ,2011.
- [11] J. Kačur, J. Minár. A benchmark solution for infiltration and adsorption of polluted water into the unsaturated-saturated porous media. *Transport in Porous Media*, submitted.
- [12] J. Kačur, B. Malengier, and H. Budáčová. Centrifugation scenarios for determination of soil parameters. *Proceedings of the XVIII International Conference on Computational Methods in Water Resources*,2010.

- [13] J. Kačur, B. Malengier, and R. Van Keer. On the mathematical analysis and numerical approximation of a system of nonlinear parabolic PDEs. *Journal for Analysis and its Applications*, 28:305-332, 2009.
- [14] H. Brezis. *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*. Springer Science+Business Media, LLC 2011, ISBN 978-0-387-70913-0.
- [15] C.B. Morrey Jr., Charles Bradford. *Multiple Integrals in the Calculus of Variations*. Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften, Springer, 1966, ISBN 978-0-387-03524-6.

7 Zoznam publikácií

1. J. Kačur, H. Budáčová, Determination of pressure-permeability relations by centrifugation, *Diffusion in Solids and Liquids VII*, Vols. 326-328 of *Defect and Diffusion Forum*, pages 261–266, 2012.
2. J. Kačur, B. Malengier, H. Budáčová, Centrifugation scenarios for determination of soil parameters, *Proceedings of the XVIII International Conference on Computational Methods in Water Resources (CMWR 2010), Barcelona, Spain, June 21-24, 2010*

8 Prednášky a poster na konferenciách

1. J. Kačur, B. Malengier, H. Budáčová, poster: *Centrifugation Scenarios for Determination of Soil Parameters*, 18th International Conference on Computational Methods in Water Resources, Barcelona, Spain, 21.-24.6.2010
2. J. Kačur, H. Budáčová, talk: *Determination of pressure-saturation-permeability relations by centrifugation*, 7th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids 2011, Algarve, Portugal, 26.-30.6.2011
3. J. Kačur, H. Budáčová, talk: *Determination of soil parameters by centrifugation based on time measurements*, Advanced Computational Methods in Engineering, Liege, Belgium, 14.-17.11.2011

9 Summary

In this thesis we discuss porous media flow and contaminant transport under centrifugation. We model the saturated flow by Darcy's equation and the unsaturated flow by nonlinear and degenerate Richard's equation. There are two interfaces present during the process, which are modeled using ordinary differential equations. We use the method of lines to obtain numerical algorithm, which is both accurate and fast. We use it to solve the inverse problem and compute the soil parameters. Our method requires only non-invasive measurements of time, when prescribed rotational momentum was achieved and volume of input and expelled water.

We provide theoretical background of such numerical computations. We make a few additional assumptions and define approximate solutions to given problem of porous media flow and contaminant transport. We derive a priori estimates and prove the convergence to weak solution.