



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY FYZIKY A INFORMATIKY



Mgr. Pavol Kišon

Autoreferát dizertačnej práce

**Numerical modeling of single phase and two
phase flow in porous media**

(Numerické modelovanie jednofázového a dvojfázového toku v porózných
médiách)

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

9.1.5 Numerická analýza a vedecko-technické výpočty

Bratislava 2014

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. Pavol Kišon,
KMANM, FMFI UK
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

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

Oponenti:
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

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

Možnosť predikovať pohyb vody alebo vo všeobecnosti tekutiny v poróznom prostredí zohráva v dnešných časoch dôležitú úlohu. Medzi najvýznamnejšie aplikácie patrí nepochybne možnosť predpovedať šírenie toxických látok, ktoré boli vyliate na pôdu a vedieť tak určiť čas či množstvo látky, ktoré zasiahli podzemné vody. K tomu je samozrejme nevyhnutné poznať charakteristiky daných pôd. Proces infiltrácie pri nenasýtených pôdach je prirodzeným spôsobom viditeľný pri skládkach odpadu, kedy v dôsledku dažďov prichádza k presakovaniu vody do pôdy, ktorá častokrát nesie so sebou toxické látky.

Hydraulickú vodivosť možno určiť buď na základe meraní vykonaných priamo v teréne alebo v laboratóriu pričom vo všeobecnosti tieto postupy možno rozdeliť na dva typy - priame metódy, ktoré priamo merajú napr. hodnoty saturácie vo vzorke (zvyčajne tieto merania trvajú dlhý čas a vyžadujú nákladné zariadenie), a nepriame metódy, ktoré využívajú merania založené na charakteristike vody obsiahnutej vo vzorke, ako je napríklad gravitačné centrum, množstvo vody vytlačenej zo vzorky, množstvo vody vtlačenej do vzorky, front nasýtenia a pod [11, 10, 2].

Význam centrifúgy v porovnaní s klasickými metódami spočí hlavne v čase, za ktorý možno merania získať. V začiatkoch sa využívali merania stavov ekvilibrií, ktoré sa dosiahli pri použití konštantnej rotačnej rýchlosti a kontrolovaním okrajových podmienok, no tento proces je výrazne časovo náročný, pretože dosiahnutie ekvilibria je asymptotický proces. Preto sa začali do popredia dostávať merania, ktoré dávajú okamžitú charakteristiku - a to napr. už spomenuté gravitačné centrum či množstvo vtlačenej/vytlačenej vody do/zo vzorky. Týmto spôsobom možno proces určovania vlastností pôd urýchliť z niekoľkých mesiacov na niekoľko dní či dokonca hodín.

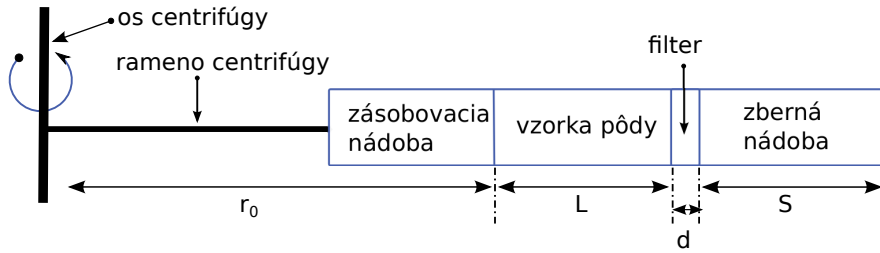
Táto práca vychádza z publikovaných prác, v ktorých boli skúmané matematické modely procesu centrifugácie a rôzne varianty experimentov ako aj ich numerické riešenie. Táto práca je rozdelená do dvoch hlavných celkov. Prvým je jednofázový tok, kde sa zameriame na adaptáciu a aplikáciu matematických modelov na reálne dáta a porovnáme nájdené výsledky s výsledkami získanými klasickou metódou. Vzorky pôdy môžu pri centrifugácii podliehať konsolidácii resp. kompresii, čo znamená, že na vzorku bola vyvinutá sila, ktoré sa za normálnych podmienok v pôde nevyskytuje a pri veľkej sile môže výrazným spôsobom meniť charakteristiky pôdy a to aj pri použití malej centrifúgy. Z experimentov však vyplýva, že malá centrifúga nie je vhodná pre vzorky s nízkou hydraulickou vodivosťou.

Druhým hlavným celkom je modelovanie dvojfázového toku, kde vháňame zmáčavú kvaplinu do vzorky, ktorá bola na začiatku plne nasýtená nezmáčavou kvapalinou. Dvojfázový tok prirodzeným spôsobom nadväzuje na jednofázový tok, kde bol ako druhá tekutina implicitne uvažovaný vzduch. Pre dvojfázový tok ukážeme existenciu slabého riešenia, ktorá pre náš formulovaný problém doteraz v literatúre ukázaná nebola a tiež niektoré numerické výsledky modelovania.

2 Jednofázový tok

2.1 Popis modelu centrifúgy

Centrifúga pozostáva z ramena, na ktorom je umiestnená vzorka pôdy, filter a zberná nádoba a zásobovacia nádoba, v ktorej sa nachádza voda, ktorá sa infiltruje do vzorky. Schématické znázornenie centrifúgy je na obr. 1. Vzorka má dĺžku L , pričom filter je hrúbky d a vzorka je umiestnená vo vzdialenosti r_0 od osi centrifúgy. V zásobovacej nádobe sa nachádza voda s výškou $\ell = \ell(t)$, pričom počiatočná výška vodnej hladiny je ℓ_0 .



Obr. 1: Základné usporiadanie centrifúgy

2.2 Richardsova rovnica pre centrifúgu

Matematický model je založený na Richardsovej rovnici

$$0 = \partial_r q = \partial_r \left[K_s \left(\partial_r h - \frac{\omega^2}{g} r \right) \right], \quad h \geq 0 \quad (1)$$

$$\partial_t \theta - \partial_r \left[K(\theta) \left(\partial_r h - \frac{\omega^2}{g} r \right) \right] = 0, \quad h < 0 \quad (2)$$

kde q je tok kvapaliny, K_s je saturovaná hydraulická konduktivita, h hydraulický tlak, ω uhlová rýchlosť, g gravitačná konštanta, θ saturácia, $K(\theta) = K_s k_r(\theta)$ nenasýtená hydraulická vodivosť a k_r relatívna hydraulická vodivosť. Prvá rovnica (1) zodpovedá toku v nasýtenom prostredí z Darcyho zákona a druhá toku v nenasýtenom prostredí [4, 1].

Na riešenie Richardsovej rovnice potrebujeme poznať K_s , krivku nasýtenia $\theta(h)$ a relatívnu hydraulickú vodivosť $k_r(h)$. Existuje niekoľko modelov pre $\theta(h)$ a $k_r(h)$ a medzi najpoužívanejšie, ktoré využívame aj v tejto práci, patrí van Genuchten-Mualemov model

$$S = \frac{1}{(1 + |\gamma h|^n)^m} \quad (3)$$

$$k_r(S) = \sqrt{S} \left[1 - \left(1 - S^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (4)$$

kde $S = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$ je efektívna saturácia, θ_s je volumetrický obsah vody pri plnej saturácii, θ_r je reziduálny volumetrický obsah vody a parametre $n > 2$, $\gamma < 0$ sú empirické parametre pôdy soil parameters a $m = 1 - \frac{1}{n}$. Využitím definície efektívnej saturácie možno vzťah (2) pre nenasýtený tok napísať ako

$$\phi \partial_t S - \partial_x q = 0, \quad q = K(S) \left(\partial_x h - \frac{\omega^2}{g} r \right) \quad (5)$$

Pre zúplnenie matematického modelu špecifikujeme ešte okrajové a počiatočné podmienky. Okrajové podmienky závisia od konkrétneho typu problému, ktorý riešime. Vo všeobecnosti však využívame pre:

- ľavú okrajovú podmienku:
 - Dirichletovu podmienku $S(t, 0) = s_0(t)$
 - Neumannovu podmienku $q(t, 0) = q_0(t)$, $\forall t$ ak je tok na hranici známy; pre drenáž je to nulový tok $q_0(t) \equiv 0$, $\forall t$
- pravú okrajovú podmienku
 - Dirichletovu podmienku (pre saturovaný tok je to $s_0(t) \equiv 1 \forall t$)
 - Neumannovu podmienku $q(t, 0) = q_N(t)$, $\forall t$ pre známy tok, napr. nulový $q_N(t) \equiv 0$, $\forall t$
 - zmiešaná podmienka, ktorá napríklad pri voľnom výtoku má tvar

$$\begin{cases} q_0(t) \equiv 0, & h(t, L) < 0 \\ s_0(t) \equiv 1, & h(t, L) \geq 0 \end{cases}$$

Počiatočná podmienka je pri našich testoch zvyčajne volená ako $S(0, x) \equiv 1$, t.j. začíname z plne nasýtenej vzorky.

2.3 Numerický model pre nenasýtený tok

Pre modelovanie nenasýteného toku sú významné dva druhy experimentov - imbibícia, kedy do suchej vzorky centrifugáciou vtlačáme zo zásobnej nádoby kvapalinu, a drenáž, pri ktorej je zásobná nádoba prázdna a zo vzorky plne nasýtenej kvapalinou túto kvapalinu centrifugáciou vytlačáme a zachytávame v zbernej nádobe. Z praktického hľadiska je model pre imbibíciu výhodnejší, keďže charakteristiky ako je napríklad gravitačné centrum dávajú lepšie rozlíšiteľné hodnoty ako pri drenáži. Žiaľ, pre pôdne vzorky nie je imbibícia vhodná, keďže experiment potrebujeme začať zo známeho stavu, čo je buď suchá vzorka alebo známa hodnota saturácie. Určiť počiatočnú saturáciu vo vzorke je v našich podmienkach neuskutočniteľné a použitie suchej vzorky pôdy neprichádza do úvahy, keďže pôda pri vysychaní môže tvoriť praskliny a meniť svoju štruktúru, čím sa výrazne menia aj jej charakteristiky. Preto hlavné zameranie modelovania je na proces drenáže.

Pre numerické modelovanie nenасыteného toku pri dreháži vyjadríme (5) v hydraulickom tlaku h . Z predchádzajúcich výsledkov vieme, že pri drenáži vzniká vo vnútri vzorky rozhranie $s \in \langle 0, L \rangle$ medzi nenасыtenou časťou vzorky na intervale $\langle 0, s \rangle$ a nasýtenou v $\langle s, L \rangle$. Pretože pre nás neznámy profil saturácie sa nachádza len na intervale $\langle 0, s \rangle$, má pre nás zmysel zamerať sa práve na tento interval. Využitím transformácie

$$y = \frac{r - r_0}{s}$$

ho transformujeme ho na interval $\langle 0, 1 \rangle$, čím získame transformovanú rovnicu

$$\phi \partial_h S \partial_t h(t, y) = \frac{1}{s(t)} \partial_y \left[K(S) \left(\frac{1}{s} \partial_y h - \frac{\omega^2}{g} (r_0 + y s(t)) \right) \right] + y \frac{\dot{s}(t)}{s(t)} \partial_h S \partial_y h \quad (6)$$

Tento model môžeme v našom jednorozmernom prípade v priestore diskretizovať voľbou vhodných uzlových bodov

$$0 = y_0 < y_1 < \dots < y_i < \dots y_N = 1$$

Tieto body zodpovedá pohybujúcim sa bodom $x_i(t) = r_0 + y_i s(t)$. Uvedená diskretizácia vedie na systém ODR. Označme vzdialenosť dvoch uzlových bodov ako $\alpha_i := y_i - y_{i-1}$, $i = 1, \dots, N$ a $\alpha_0 := 0$, hodnoty v polovičných bodoch $y_{i+1/2} := y_i + \frac{\alpha_{i+1}}{2}$, $h_{i+1/2} := \frac{1}{2} (h_{i+1} + h_i)$, $K_{i+1/2} := K(h_{i+1/2})$ a aproximácie $h_i(t) \approx h(y_i, t)$, $\dot{h}_i(t) \approx \partial_t h(y_i, t)$

$$\begin{aligned} \partial_y h|_{y=y_{i+1/2}} &\approx \partial_y h_{i+1/2} = \frac{h_{i+1}(t) - h_i(t)}{\alpha_{i+1}} \\ q_{i+1/2} &= K_{i+1/2} \left(\frac{1}{s} \partial_y h_{i+1/2} - \frac{\omega^2}{g} (r_0 + s(t) y_{i+1/2}) \right) \end{aligned}$$

pre $i = 0, \dots, N-1$. Potom aproximačná schéma (6) v bode y_i , $i = 1, \dots, N-1$ je nasledovná:

$$\dot{h}_i = \frac{1}{\partial_h S|_{y=y_i}} \frac{2}{\phi(\alpha_i + \alpha_{i+1})s} \left[q_{i+1/2} - q_{i-1/2} \right] + \frac{\dot{s}}{s} y_i \left. \frac{d\mathcal{L}(z; y_i)}{dz} \right|_{z=y_i} \quad (7)$$

s okrajovými podmienkami

$$q(t, y_0) = 0 \quad (8)$$

$$\begin{cases} q(y_N) = 0, & h < 0 \\ h(y_N) = 0, & \text{inak} \end{cases} \quad (9)$$

kde $\mathcal{L}_i(z; y_i)$ je Lagrangeov polynóm druhého stupňa. Nakoniec ostáva ešte podmienka pre modelovanie pohyb frontu s . Pretože podmienka na zachovanie

množstva kvapaliny v sústave je veľmi dôležitá pre správny výpočet gravitačného centra, má zmysel počítať s práve z tejto algebraickej podmienky

$$\phi \left(\sum_{i=0}^N c_i u_i - s(t) \right) + w_{out}(t) = \ell_0 \quad (10)$$

kde

$$c_i = s(t) \frac{\alpha_{i+1} + \alpha_i}{2}, \quad i = 1, \dots, N-2$$

$$c_0 = s(t) \frac{\alpha_0}{2}, \quad c_N = s(t) \frac{\alpha_{N-1}}{2}$$

a $w_{out}(t)$ je celkové množstvo vody vytlačenej zo vzorky do zbernej nádoby a ℓ_0 počiatkové množstvo vody v zásobnej nádobe.

2.4 Inverzná úloha

Efektívna saturácia S závisí od použitých parametrov pôdy n, γ t.j. $S = S(t, x, \gamma, n)$. Následne z vypočítanej hodnoty S môžeme určiť gravitačné centrum vnútri vzorky, ktoré označíme $G(t, \gamma, n)$. Okrem toho vieme získať množstvo vody v zásobnej nádobe $M_i(t, \gamma, n)$ a množstvo vody v zbernej nádobe $M_o(t, \gamma, n)$. Všetky tieto hodnoty sú len funkciami času a nezávisia od priestorovej súradnice.

Na druhej strane máme hodnoty namerané v časoch t_1, \dots, t_m , ktoré označíme čiarou napr. $\bar{G}(t_1)$. Našou snahou je potom nájsť také hodnoty parametrov n, γ , ktoré minimalizujú rozdiel štvorcov nameraných a vypočítaných hodnôt, t.j. minimalizujeme funkcionál

$$\mathcal{F}(\gamma, n) = w_1 \sum_{i=1}^m (G_w(t_i, \gamma, n) - \bar{G}_w(t_i))^2 + w_2 \sum_{i=1}^m (M_{wi}(t, \gamma, n) - \bar{M}_{wi}(t_i))^2 + w_3 \sum_{i=1}^m (M_{wo}(t, \gamma, n) - \bar{M}_{wo}(t_i))^2 \quad (11)$$

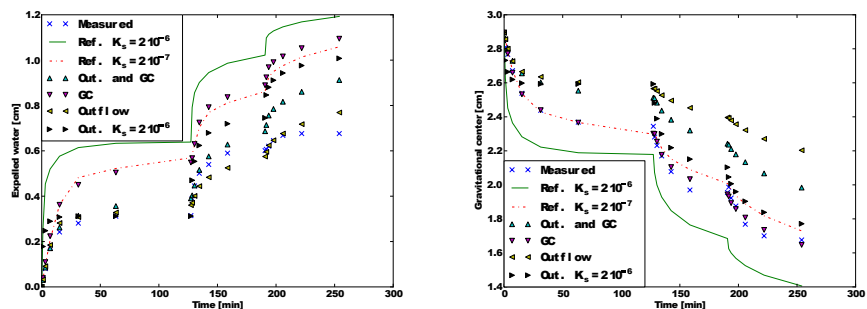
kde w_1, w_2, w_3 sú váhy, ktoré môžeme prisúdiť jednotlivým typom. Na minimalizáciu využívame $\mathcal{F}(\gamma, n)$ možno použiť napríklad Levenberg-Marquardtovu metódu.

2.5 Experimenty

V tabuľke 1 uvádzame porovnanie výsledkov zistenia saturovanej hydraulickéj konduktivity klasickou metódou a použitím centrifúgy. Výsledky experimentov pre 90% zmes piesku 10% kaolínu uvádzame na obrázku 2. Uvádzame výsledky pre optimalizáciu s použitím meraní vytlačenej vody a gravitačného centra (Out and GC), len gravitačného centra (GC) a len vytlačenej vody (Out). Pre porovnanie uvádzame tiež výsledky s nájdenými optimálnymi parametrami, kde pre referenciu bola použitá iná hodnota K_s .

| Name | Klasická metóda | Model centrifúgy |
|---------------|-----------------------|-----------------------|
| | K_s [m/s] | avg. K_s [m/s] |
| Filter tube 1 | $5.53 \cdot 10^{-8}$ | $9.32 \cdot 10^{-8}$ |
| Filter tube 2 | $4.95 \cdot 10^{-8}$ | $7.50 \cdot 10^{-8}$ |
| Filter tube 4 | $9.89 \cdot 10^{-8}$ | $7.44 \cdot 10^{-8}$ |
| Filter tube 5 | $8.17 \cdot 10^{-8}$ | $6.24 \cdot 10^{-8}$ |
| Kaolin tube 1 | $1.136 \cdot 10^{-8}$ | $1.173 \cdot 10^{-8}$ |
| Kaolin tube 2 | $1.209 \cdot 10^{-8}$ | $1.139 \cdot 10^{-8}$ |
| Kaolin tube 4 | $1.331 \cdot 10^{-8}$ | $1.137 \cdot 10^{-8}$ |
| Kaolin tube 5 | $1.259 \cdot 10^{-8}$ | $1.117 \cdot 10^{-8}$ |

Tabuľka 1: Saturevaná konduktivita pre vzorky pôdy a filtre



Obr. 2: Experiment s centrifugáciou. Krížiky označujú namerané hodnoty, trojuholníky hore pre optimálne hodnoty nájdené s použitím grav. centra (GC) a vytlačenej vody (Out), trojuholníky dolu len s GC, trojuholníky vľavo len pre Out. Celé čiary označujú referenčné krivky pre porovnanie s použitím parametrov K_s nájdené klasickou metódou .

3 Dvojfázový tok

Pre simulovanie infiltrácie vody alebo všeobecne zmáčavej kvapaliny (označujeme indexom w) do vzorky plne nasýtenej nezmáčavou kvapalinou (označujeme indexom n) sa využíva model založený na jednofázovom modeli, v ktorom sme doteraz implicitne predpokladali ako druhú tekutinu vzduch.

3.1 Matematický model

Pri dvojfázovom modeli môže byť sila pôsobiaca na tekutinu ako gravitačná α i odstredivá a tento člen môžeme spoločne označiť pre kvapalinu α

$$c_\alpha(x) = \rho_\alpha c(x) \quad (12)$$

$$c(x) = \begin{cases} g, & \text{pre gravitačnú silu} \\ \omega^2 x, & \text{pre odstredivú silu} \end{cases} \quad (13)$$

Potom systém pre jednorozmerný prípad pre nenasýtený tok je daný:

$$\phi \partial_t S_w + \partial_x q_w = 0, \quad \text{with } q_w = -K_i \frac{k_{rw}}{\mu_{rw}} (\partial_x p_w - c_\alpha(x)) \quad (14)$$

$$\phi \partial_t S_n + \partial_x q_n = 0, \quad \text{with } q_n = -K_i \frac{k_{rn}}{\mu_{rn}} (\partial_x p_n - c_\alpha(x)) \quad (15)$$

$$S_w + S_n = 1 \quad (16)$$

$$p_c = p_n - p_w \quad (17)$$

kde S_α, q_α je efektívna saturácia a tok kvapaliny $\alpha \in \{w, n\}$, p_c je kapilárny tlak a K_i permeabilita vzorky. Použitím celkového toku $q_t = q_w + q_n$ vzťahu (17) a vzťahu pre kapilárny tlak $h_c = \frac{p_c}{\rho_w g}$ možno (14) a (15) pretransformovať do jednej rovnice vyjadrenej v kapilárnom tlaku h_c a efektívnej saturácii zmáčavej kvapaliny $S_w = S_w(h_c)$

$$\phi \partial_t S_w + \partial_x \left[\frac{k_{rw}}{k_{rw} + \mu k_{rn}} \left(K_s \mu k_{rn} \partial_x h_c + q_t - K_s \mu k_{rn} (\rho - 1) \frac{c(x)}{g} \right) \right] = 0 \quad (18)$$

Tok q_t , ktorý tu vystupuje, je ešte neznámy, vieme o ňom však, že je konštantný v priestore a je teda iba funkciou času.

Pre úplnosť systému pridáme ešte okrajové podmienky a počiatočnú podmienku. Predpokladáme, že ľavá okrajová podmienka je Dirichletova s konštantnou hodnotou saturácie $s_0 < 1$ a na pravom okraji predpokladáme nulový tok:

$$S_w(t, x)|_{x=0} = s_0, \quad 0 \leq s_0 < 1, \quad s_0 = \text{konšt.} \quad (19)$$

$$q_w(S_w(t, x), x)|_{x=L} = 0 \quad (20)$$

Táto úloha je skúmaná v prácach [3, 9] z numerického hľadiska len v špeciálnom prípade a to bez použitia vonkajších síl (gravitácia, centrifugácia) a je preukázané, že je ťažko numericky realizovateľná pre s_0 blízko 1.

Na začiatku predpokladáme, že vzorka je plne nasýtená nezmáčavou kvapalinou, t.j.

$$S_0(x) = S_w(0, x) \equiv 0, \quad x \in \langle 0, L \rangle \quad (21)$$

kde L je dĺžka vzorky. Poznamenávame, že počiatočná podmienka a okrajové podmienky nie sú vo všeobecnosti konzistentné.

Funkcia q_t je neznáma, pri danom s_0 je však jednoznačne definovaná a možno ju určiť zo zákona zachovania hmoty

$$\int_0^t q_t(s) ds = \phi \int_{\Omega} S_w(x, t) dx, \quad \Omega = \langle 0, L \rangle \quad (22)$$

Teda máme riešiť systém (18) - (22). Z (22) možno postupne vyjadriť celkový tok q_t a dosadiť do (18), čím dostaneme ekvivalentnú PDR rovnicu s nelokálnym členom

$$\phi \partial_t S_w - \partial_x [D(S_w) \partial_x S_w - d(S_w) (a_0 - b_0 \partial_x S_w|_{x=0}) - G(S_w)] = 0 \quad (23)$$

kde

$$\begin{aligned} d(S_w) &:= \frac{k_{rw}}{k_{rw} + \mu k_{rn}} \\ D(S_w) &:= -K_s \mu d(S) k_{rn} \partial_S h_c \\ G(S_w, x) &:= K_s \mu \frac{k_{rw} k_{rn}}{k_{rw} + \mu k_{rn}} (1 - \rho) \frac{c(x)}{g} \end{aligned}$$

s okrajovými podmienkami

$$S_w(t, 0) = s_0, \quad 0 \leq s_0 < 1 \quad \forall t > 0 \quad (24)$$

$$Q(S_w(t, x), x)|_{x=L} = 0, \quad \forall t \quad (25)$$

a počiatočnou podmienkou

$$S_w(0, x) = S_0(x) \equiv 0 \quad (26)$$

Tento model má degeneráciu v D pre $S_w \rightarrow 1$ ako aj pre $S_w \rightarrow 0$, čo komplikuje numerickú realizáciu. Numerická obtiažnosť sa výrazne zvyšuje, ak sa s_0 blíži k 1. Otvorenou otázkou taktiež ostáva, či prichádza k vytvoreniu nasýteného frontu ak ľavá okrajová podmienka je nasýtená, t.j. $S_w(t, x)|_{x=0} = 1$, rovnako ako sme to videli pri jednofázovom toku [8]. Naše experimenty naznačujú, že takéto rozhranie pri dvojfázovom toku nenastane.

V nasledujúcej časti dokážeme existenciu celkového toku q_t a následne existenciu slabého riešenia pre ľavú Dirichletovu podmienku $s_0 < 1$. Existenciu riešenia tejto úlohy sme v literatúre nenašli a preto uvádzame jeho dôkaz konštruktívnou metódou, ktorá je aj podstatou našej numerickej aproximácie.

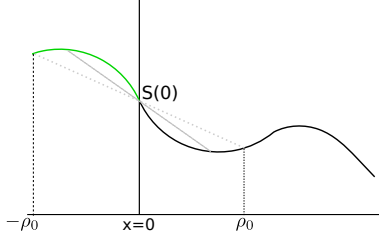
V ďalšom texte, keďže pracujeme iba so saturáciou zmáčavej kvapaliny S_w , vynecháme pre zjednodušenie notácie index w .

3.2 Existencia slabého riešenia

Regularizácia $D(S)$ and $\partial_x S|_{x=0}$

Systém (23) s danými okrajovými podmienkami a počiatočnou je silne degenerovaný v dôsledku dvojnásobnej degenerácie D . Navyiac ide o nelokálny konvekčno-difúzny problém, ktorého všetky členy sú v bode (t, x) okrem člena obsahujúci $\partial_x S|_{x=0}$, ktorý je v bode $(t, 0)$.

Uvažujme náš pracovný priestor $\Omega = (0, L)$ kde L je dĺžka vzorky. Problém s existenciou variačného riešenia je dôsledkom faktu, že (23) nám môže dať iba energetické odhady v Sobolevovom priestore $H^1 = W_2^1(\Omega)$ a to len v prípade, že $D(S)$ by nebolo degenerované pre $S = 0$. No i tak pre ľubovoľného kandidáta na slabé riešenie $S \in H^1$ nemá výraz $\partial_x S|_{x=0}$ zmysel, pretože $\partial_x S \in L_2(\Omega)$ a $\partial_x S|_{x=0}$ nie je definované v $x = 0$, čo znamená výrazný problém pre variačnú formuláciu a garanciu jej existencie.



Obr. 3: Bodová inverzia S bodom $S(0) = S(t, 0)$

Pre $S \in H^1(\Omega)$ existuje stopa $S|_{x=0} = s_0$ a preto rozšírime S z $(0, L)$ na S_{ρ_0} definovanú na $(-\rho_0, L)$ tak, že spravíme bodovú symetriu S on $\langle 0, \rho_0 \rangle$ cez s_0 (obr. 3), takže S_{ρ_0} už je spojitá tiež v bode $x = 0$ (pričom derivácia v tomto bode vo všeobecnosti neexistuje).

Vhodnou regularizáciou funkcie S_{ρ_0} dostaneme regularizovanú funkciu $S^h(x)$, ktorá už má derivácie všetkých rádov a $S^h \rightarrow S$ v $H^1(-\rho_0, \rho_0)$. Preto namiesto $\partial_x S|_{x=0}$ môžeme zobrať $\partial_x S^h|_{x=0}$, čo je korektné definované a navyiac, ak S je hladká, potom

$$\partial_x S^h|_{x=0} \xrightarrow{h \rightarrow 0} \partial_x S|_{x=0}.$$

Tak dostávame regularizovaný problém

$$\phi \partial_t S - \partial_x [D(S) \partial_x S - d(S) (a_0 - b_0 \partial_x S^h|_{x=0}) - G(S)] = 0 \quad (27)$$

s podmienkami (24), (25) a (26).

V dôsledku Dirichletovej okrajovej podmienky $S|_{x=0} = s_0 < 1$ a konvekčno-difúznej úlohe, riešenie nikdy neprekročí hodnotu s_0 a teda ostáva nám jediná degenerácia v eliptickom člene $D(S)$ for $S = 0$. Tej však možno predísť regularizáciou, kde $D(S)$ nahradíme $D^h(S)$:

$$D^h(S) = \begin{cases} D(S), & S \geq h \\ \frac{D(h)}{h} S, & S \leq h \end{cases}$$

Z teoretických výsledkov taktiež vyplýva, že $S^h \rightarrow S$ v $L_2(\Omega)$. Ďalej predpokladáme, že parameter h je dostatočne malý, takže je splnená podmienka V -elipticity

$$(D(z)\xi, \xi) \geq c_h \|\xi\|^2, \quad \forall z \in (0, 1) \quad (28)$$

a $c_h \rightarrow 0$ pre $h \rightarrow 0$. Parameter h berieme ako pevný.

3.3 Definícia slabého riešenia a dôkaz jeho existencie

Definícia. Označme $(u, v) = \int_0^L u(x) v(x) dx$. Potom S nazývame slabým riešením (27) ak $S \in L_2(I, V) \cap C(I, L_2)$ a nasledujúce identita platí $\forall v \in V$, $V = \{v \in H^1 : v|_{x=0} = 0\}$:

$$\begin{aligned} \phi \partial_t (S, v) + \\ + (D(S) \partial_x S - d(S) [a_0 - b_0 \partial_x S^h|_{x=0}] - G(S), \partial_x v) = 0 \end{aligned} \quad (29)$$

pre skoro všetky $t \in I = (0, T)$ a $S(t) \rightarrow S_0(x)$ v L_2 pre $t \rightarrow 0$.

Na dôkaz existencie slabého riešenia využijeme Rotheho metódu s časovou diskretizáciou, ktorá je popísaná v článku [6]. Nech $\tau = \frac{T}{n}$ pre $n \in \mathbb{N}$ a uvažujme nasledovné aproximácie

$$\begin{aligned} S_i &\approx S(t_i, x), \quad t_i = i\tau, \quad i = 1, 2, \dots, n \\ \partial_t S(t_i, x) &\approx \delta S_i = \frac{S_i - S_{i-1}}{\tau}, \quad i = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

kde $S_0 = S(t, 0)$ a S_i je definované ako

$$\begin{aligned} (\delta S_i, v) + (D(S_{i-1}) \partial_x S_i, \partial_x v) - (d(S_{i-1}) [a_0 - b_0 \partial_x S_{i-1}^h|_{x=0}], \partial_x v) - \\ - (G(S_{i-1}), \partial_x v) = 0, \quad \forall v \in V \end{aligned} \quad (30)$$

čo je lineárna eliptická úloha pre S_i .

Pre dôkaz využívame tiež fakt, že funkcie $d(s)$, $G(s)$, $D(s)$ možno ohraničiť konštantou, čo je možné ľahko overiť z ich definície pre dvojfázový model:

$$|d(s)| \leq C, \quad |D(s)| \leq C, \quad |G(s)| \leq C \quad (31)$$

Následne možno ukázať platnosť nasledujúcej lemy:

Lema 1. Platia nasledujúce nerovnosti:

$$\max_{i \in \{1, \dots, n\}} \|S_i\|_0 \leq C, \quad \sum_{i=1}^n \tau \|S_i\|^2 \leq C, \quad \sum_{i=1}^n \|S_i - S_{i-1}\|_0^2 \leq C$$

Ak definujeme Rotheho funkciu $S_n(t)$ ako

$$\begin{aligned}
S_n(t) &= S_{i-1} + \delta S_i(t - t_i) \quad \forall t \in (t_{i-1}, t_i) \\
\bar{S}_n(t) &= S_{i-1} \quad \forall t \in (t_{i-1}, t_i) \\
\bar{S}_n(0) &= S_0
\end{aligned}$$

potom platia nasledujúce nerovnosti:

Dôsledok. Dôsledkom lemy (1) sú nasledujúce nerovnosti:

$$\max_{t \in (0, T)} \{ \|S_n(t)\|_0, \|\bar{S}_n(t)\|_0 \} \leq C \quad (32)$$

$$\int_0^T \|S_n(t)\|^2 dt \leq C(h) \quad (33)$$

$$\int_0^T \|\bar{S}_n(t)\|^2 dt \leq C(h) \quad (34)$$

$$\int_0^T \|S_n(t) - \bar{S}_n(t)\|_0^2 dt \leq \frac{C}{n} \quad (35)$$

Uvedené odhady nám dávajú kompaktnosť v premennej x a preto potrebujeme ešte odhady, ktoré nám zaručia kompaktnosť v premennej t . To je výsledkom nasledujúcej lemy:

Lema 2. Platí nerovnosť:

$$\tau \sum_{i=1}^{n-k} \|S_{i+k} - S_i\|_0^2 \leq C(h) k \tau \quad (36)$$

Odhad (36) pre $S_n(t)$ možno prepísať do tvaru

$$\int_0^{T-z} \|S_n(t+z) - S_n(t)\|_0^2 dt \leq C \left(|z| - \frac{1}{n} \right) \quad (37)$$

kde $k\tau \approx z$ je malé, $0 < z \leq z_0$. Ďalšie detaily možno nájsť v článku [7, 6]. Použitím výsledkov (35), (37) dostávame nasledujúcu lemu:

Lema 3. Postupnosť $\{S_n(t)\}$ je kompaktná v $L_2(I, L_2(\Omega))$ a existuje $\bar{S} \in L_2(I, V) \cap C(I, L_2)$ a vybraná podpostupnosť $\{\bar{S}_n(t)\} \subset \{S_n(t)\}$ taká, že $\bar{S}_n \rightarrow \bar{S}$ v $L_2(I, L_2)$, $\bar{S}_n \rightarrow \bar{S}$ v $L_2(I, V)$ a $\bar{S}_n \rightarrow \bar{S}$ skoro všade v $Q_T = I \times \Omega$.

Na dokázanie, že S je slabým riešením úlohy (29). Prepísaním variačnej formulácie (30) do ekvivalentného tvaru $\forall v \in V$ a pre skoro všetky $t \in I$

$$\begin{aligned}
&\partial_t(S_n(t), v) + (D(\bar{S}_n(t - \tau)) \partial_x \bar{S}_n(t), \partial_x v) - \\
&\quad - (d(\bar{S}_n(t - \tau)) [a_0 - b_0 \partial_x \bar{S}_n^h(t - \tau, 0)], \partial_x v) - \\
&\quad \quad \quad - (G(\bar{S}_n(t - \tau)), \partial_x v) = 0
\end{aligned}$$

a následnou dvojitou integráciou možno ukázať konvergenciu jednotlivých členov pre skoro všetky $(t, x) \in I \times \Omega$ t.j.

$$S_n \rightarrow S, \bar{S}_n \rightarrow S \text{ na } L_2(I, L_2(\Omega))$$

$$\int_0^t \int_0^s (D(\bar{S}_n(t-\tau)) \partial_x \bar{S}_n(t), \partial_x v) dt ds \rightarrow \int_0^t \int_0^s (D(S_n(t)) \partial_x S_n(t), \partial_x v) dt ds$$

Ostatné členy sa ukážu analogicky. Odtiaľto limitným prechodom pre $n \rightarrow \infty$ a následnou dvojnásobnou deriváciou podľa t dostávame požadovanú identitu (29). Ďalej ešte možno tiež ukázať, že $S \in C(I, L_2)$ a $S(t) \rightarrow S_0$ v $L_2(\Omega)$ pre $t \rightarrow 0$. Existenciu zodpovedajúceho celkového toku q_t získame zo vzťahu (22), kde S je slabé riešenie úlohy.

Poznámka. Existenciu slabého riešenia v zmysle (22) možno dokázať aj bez použitia regularizácie D . Pretože však nemožno ukázať, že $S \in L_2(I, V)$ zato však $\beta(S) \in L_2(I, V)$ kde $\beta(S) = \int_0^z D(\xi) d\xi$, musí byť potom slabé riešenie modifikované použitím substitúcie $w = \beta(S)$ (ďalšie detaily k tomuto postupu možno nájsť v [5]).

3.4 Numerický model

Vtláčanie zmáčavej kvapaliny do vzorky plne nasýtenej nezmáčavou kvapalinou dáva vznik rozhrania medzi nenasýtenou časťou a suchou (kde suchou rozumieme obsahujúcu iba nezmáčavú kvapalinu). Preto, podobne ako pre jednofázový model, možno definovať front s medzi týmito dvoma zónami. Z numerického hľadiska sa ale ukazuje výhodnejšie použiť priamu diskretizáciu intervalu L , čím riešime priamo systém

$$\phi \partial_t S = \partial_x [D(S) \partial_x S - d(S) (a_0 - b_0 \partial_x S|_{x=0}) - G(S)]$$

Následne spravíme priestorovú diskretizáciu a definujeme vhodné uzlové body

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_i < \dots < x_N = L$$

Označme vzdialenosť medzi dvoma uzlovými bodmi $\alpha_i := x_i - x_{i-1}$, $i = 1, \dots, N$ a $\alpha_0 = 0$ a stredové body ako $x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_{i+1} + x_i)$, $i = 0, 1, \dots, N-1$.

Ak označíme $u_i(t) \approx S(y_i, t)$, $\forall i = 1, \dots, N-1$ a aproximujeme deriváciu $\partial_t S(y_i, t) \approx \dot{u}_i(t)$ na intervale $I_i = (x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$, môžeme zapísať systém ODR v bode x_i ako

$$\dot{u}_i = \frac{2}{\phi(\alpha_i + \alpha_{i+1})} (Q_{i+1/2} - Q_{i-1/2}) \quad (38)$$

pre $i = 1, \dots, N - 1$, kde $Q_{i+1/2}$ je aproximácia toku v bode $x_{i+1/2}$ daná (v bode $x_{i-\frac{1}{2}}$ počítame analogicky)

$$Q_{i+1/2} = D(u_{i+1/2}) \partial_x u \Big|_{x=x_{i+1/2}} - d\left(u_{i+\frac{1}{2}}\right) \left(a_0 - \frac{b_0}{s(t)} \partial_x u \Big|_{x=0} \right) - G\left(u_{i+\frac{1}{2}}\right)$$

$$\partial_x u \Big|_{x=x_{i+1/2}} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\alpha_{i+1}}.$$

Na nájdenie derivácie v bode x_i použijeme Lagrangeov polynóm druhého stupňa $\mathcal{L}_i(z)$ prechádzajúci bodmi (x_{i-1}, u_{i-1}) , (x_i, u_i) , (x_{i+1}, u_{i+1}) for $i = 1, \dots, N - 1$, pre $i = 0$ resp. $i = N$ použijeme zodpovedajúce tri krajné body. Výška vodnej hladiny v zásobovacej nádobe je modelovaná vzťahom

$$\dot{\ell}(t) = -q_t$$

kde q_t možno získať zo vzťahu

$$q_t = \frac{-D(s_0)}{1 - d(s_0)} \partial_x S \Big|_{x=0} + \frac{G(s_0) \Big|_{x=0}}{1 - d(s_0)} = a_0 - \frac{b_0}{s(t)} \partial_x S \Big|_{x=0}$$

Množstvo zmáčavej kvapaliny v systéme vieme zistiť použitím lichobežníkového pravidla ako

$$\ell(t) + \phi \left(\frac{\alpha_1}{2} + \sum_1^{N-1} u_i(t) \frac{\alpha_{i+1} + \alpha_i}{2} \right) = \ell_0. \quad (39)$$

Tak dostávame diferenciálny systém

$$\dot{w} = f(t, w), \quad (40)$$

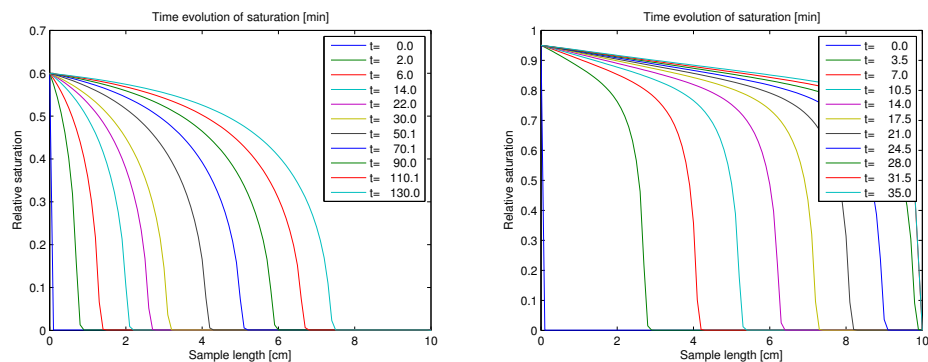
kde $w = [u_1, u_2, \dots, u_N, \ell]$, ktorý možno riešiť vhodným numerickým softvérom.

3.5 Numerické experimenty

Na obrázku 4 uvádzame riešenie dvojfázového toku pre hodnoty $r_0 = 30 \text{ cm}$, $\omega = 30 \text{ rpm}$, $K_s = 2, 4 \cdot 10^{-4}$, $L = 10 \text{ cm}$, $\phi = 0.38$, $\rho_w = 1$, $\rho_n = 0.8$, $n = 2.81$, $\gamma = 0.0189$, $\mu_w = 1$, $\mu_n = 2$ pre ľavú okrajovú podmienku $s_0 = 0, 6$ a $s_0 = 0, 95$.

4 Záver

Pre jednofázový model sme na základe meraní so štartom a zastavením centrifúgy a následným riešením numerického modelu dospeli k záveru, že využitie meraní gravitačného centra a vytlačenej kvapaliny sú postačujúcimi meraniami na určenie vlastností vzorky a zodpovedajú krivke nasýtenia získanej klasickým



Obr. 4: Riešenie dvojfázového toku pre $s_0 = 0.6$ a $T = 7800$ (vľavo) a pre $s_0 = 0.95$ a $T = 2100$ (vpravo).

prístupom. V experimentoch s kontinuálnymi meraniami už výsledky boli menej uspokojivé, čo si vysvetľujeme technickými problémami, ktoré sme pozorovali. Predpokladáme tiež, že využívanie len van Genuchtenovho modelu môže viesť k nie úplne postačujúcej aproximácii krivky nasýtenosti. Preto očakávame, že implementácia “free-form” parametrizácie bude dávať lepšie výsledky. Zároveň do ďalšieho výskumu by sme chceli pridať model konsolidácie, čo by malo viesť k presnejšej aproximácii procesov prebiehajúcich pri centrifugácii¹.

Pre dvojfázový tok vedie riešenie priamej úlohy s pevnou ľavou okrajovou podmienkou k presným riešeniam. Pre ďalší výskum ostáva implementácia riešenia inverznej úlohy na určovanie parametrov pôdy. Na základe skúseností s jednofázovým tokom ale očakávame problémy s určením gravitačného centra vzorky, pretože rozdiel v hustotách kvapalín je výrazne menší ako tomu bolo medzi kvapalinou a vzduchom. To bude viesť buď k nutnosti veľmi presných meraní alebo vo väčšej utilizácii iných meraní (ako napríklad meraní pohybu frontu).

Zoznam publikácií

1. 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.
2. J. Kačur, B. Malengier, and P. Kišon. Using global characteristics of a centrifuge outflow experiment to determine unsaturated soil parameters. *Mathematical Problems in Engineering*, 2011(ID 163020):23 pages, 2011.
3. J. Kačur, B. Malengier, and P. Kišon. Numerical modeling of two phase

¹Kód použitý pre modelovanie jednofázového toku možno nájsť na <https://gitorious.org/centrifuge/>

flow under centrifugation. In *Defect and Diffusion Forum*, volume 326, pages 221–226. Trans Tech Publ, 2012.

4. J. Kačur, B. Malengier, and P. Kišon. Unsaturation-Saturated Flow in Porous Media Under Centrifugation, pages 275–295. *Advanced Structured Materials*. Springer, 2012.
5. P. Kišon, B. Malengier, G. Di Emidio, H. Peiffer, and R. Van Keer. Inverse determination of saturated and relative permeability with a bench-scale centrifuge. *Inverse Problems in Science and Engineering*, (ahead-of-print):1–22, 2013. 18
6. B. Malengier, J. Kačur, and P. Kišon. Materials with Complex Behaviour II, chapter Numerical Model for the Determination of the Soil Retention Curve from Global Characteristics Obtained via a Centrifuge, pages 199–212. 2012.
7. B. Malengier, G. Di Emidio, M.-C. Ciocci, H. Peiffer, and P. Kišon. Saturated and relative permeability determination from weight measurements in a bench-scale centrifuge. *TIPM*, In proceeding.

Literatúra

- [1] J. Bear and Y. Bachmat. *Introduction to Modeling of Transport Phenomena*. Kluwer, Dordrecht, 1991.
- [2] T.-F. Chiu and C.D. Schackelford. Unsaturation hydraulic conductivity of compacted sand-kaolin mixtures. *Journal of Geotech. and Geoenvironmental Eng.*, 124(2):160–170, 1998.
- [3] Radek Fučík, Jiří Mikyška, Michal Beneš, and Tissa H Illangasekare. An improved semi-analytical solution for verification of numerical models of two-phase flow in porous media. *Vadose Zone Journal*, 6(1):93–104, 2007.
- [4] H. M. Haitjema. *Analytic Element Modeling of Groundwater Flow*. Academic Press, San Diego, 1995.
- [5] W Jäger and J Kačur. Solution of doubly nonlinear and degenerate parabolic problems by relaxation schemes. *Modélisation mathématique et analyse numérique*, 29(5):605–627, 1995.
- [6] J. Kačur. *Method of Rothe in evolution equations*. Springer, 1986.
- [7] J. Kačur. Solution to strongly nonlinear parabolic problems by a linear approximation scheme. *IMA journal of numerical analysis*, 19(1):119–145, 1999.

- [8] J. Kačur, B. Malengier, and P. Kišon. Using global characteristics of a centrifuge outflow experiment to determine unsaturated soil parameters. *Mathematical Problems in Engineering*, 2011(ID 163020):23 pages, 2011.
- [9] David B McWhorter and Daniel K Sunada. Exact integral solutions for two-phase flow. *Water Resources Research*, 26(3):399–413, 1990.
- [10] D.N. Singh and S. J. Kuriyan. Estimation of hydraulic conductivity of unsaturated soils using a geotechnical centrifuge. *Can. Geotech. J.*, 39:684–694, 2002.
- [11] Y. Takeshita and I. Kohno. Parameter estimation of unsaturated hydraulic properties from unsteady drainage experiments in the laboratory. In E. Alonso and P. Delage, editors, *Proceedings of the 1st International Conference on Unsaturated Soils*, volume 2, pages 567–575, 1995.

5 Summary

This work deals with modeling of single and two phase flow in a porous medium during centrifugation process. For the single phase flow we solve the inverse problem with aim to obtain porous medium properties of soil samples based on real data measurements. The usage of centrifuge plays an important role here as it reduces the times needed from month when using the classical method to days or even hours. However additional effect of consolidation or compression takes place. The results obtained by the real data measurements are then compared to those obtained by classical method. An extension to the single phase flow is two phase flow that models the displacement of fluid in a fully saturated porous medium by injection of other fluid. For the two phase model the existence of the weak solution is proved and some numerical results are shown.