

Univerzita Komenského v Bratislave  
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky  
Katedra matematickej analýzy a numerickej  
matematiky

Erika Trojáková

Autoreferát dizertačnej práce

# Numerical modelling of convection diffusion reaction

(Numerické modelovanie konvekčno-difúzných rovníc)

na získanie vedecko-akademickej hodnosti *philosophiae doctor*  
v odbore doktorandského štúdia: 9.1.5 Numerická analýza a vedecko-technické výpočty

Bratislava 2011

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. Erika Trojáková  
Katedra matematickej analýzy a numerickej matematiky FMFI UK  
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Školiteľ: Prof. RNDr. Jozef Kačur, DrSc.  
Katedra matematickej analýzy a numerickej matematiky FMFI UK  
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

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

Marianna Remešíková, PhD.  
Stavebná fakulta, Slovenská technická univerzita  
Radlinského 11, 813 68 Bratislava

prof. RNDr. Ján Filo, CSc.  
Katedra matematickej analýzy a numerickej matematiky FMFI UK  
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Autoreferát bol rozoslaný dňa: ..... **2011**

Obhajoba dizertačnej práce sa koná dňa ..... **2011** o ..... na FMFI UK, Bratislava, v miestnosti **M 113** pred komisiou pre obhajobu dizertačnej práce doktorandského štúdia vymenovanou predsedom spoločnej odborovej komisie vo vednom odbore 9-1-5 Numerická analýza a vedecko-technické výpočty

Predseda spoločnej odborovej komisie:

prof. RNDr. Michal Fečkan, DrSc.  
Katedra matematickej analýzy a numerickej matematiky  
FMFI UK  
Mlynská dolina  
842 48 Bratislava

## 1. História a súčasný stav problematiky

Jedným z odvetví numerickej matematiky je riešenie diferenciálnych rovníc, ktoré sa zaoberá ich numericou aproximáciou a konvergenciou aproximácie k presnému riešeniu. Vo väčšine reálnych problémov nepoznáme analytické riešenie a práve preto sme odkázaní práve na numericú aproximáciu.

Problém transportu kontaminantu v pórovitom prostredí patrí k jednému z mnohých modelov reálneho sveta, ktorý sa dá modelovať pomocou systémov PDE. Fyzikálne modelovanie tohto procesu je zložitý a komplexný problém, založený na mnohých fyzikálnych zákonoch (v našom prípade je fundamentálnym zákonom zákon zachovania masy) a charakterizácii všetkých možných parametrov vstupujúcich do modelu. Veľkú úlohu zohrávajú aj laboratórne merania. Prehľad o uvedenej problematike možno nájsť v [1], [2], [3].

Riešeniu systémov PDE viazaných na konvekčno-difúzne úlohy v 2D a 3D sa venuje veľké množstvo autorov. Medzi najčastejšie používané a najznámejšie metódy patria dobre známe metódy ako metóda konečných diferencií, metóda konečných objemov, upwind metóda, metóda priamok a Rotheho metóda. Pri týchto metódach prevedieme systém PDE na systém algebraických rovníc s veľkými pomerne riedkymi maticami (riešenie napr. v [19]) alebo systém ODR rovníc (riešenie napr. v [17], [18], [20]). Nadstavbou nad týmito základnými metódami môže byť metóda charakteristík ([22], [21]) alebo metóda štiepenia operátora ([4], [6]), či pohyblivých diskretizačných bodov ([23]).

Dôležitou otázkou aproximácie je konvergencia k riešeniu pôvodného systému, resp. otázka konverencie k slabému riešeniu. V dôkaze konverencie numerickej aproximácie sa budeme opierať najmä o [5], [15].

V práci dokážeme konvergenciu metódy založenej na diskretizácii v priestore a čase a metóde štiepenia operátora. Dôkaz je pomerne komplikovaný, keďže neuvažujeme ustálené prúdenie a oproti [7], [12] je náš problém bohatší o rovnicu pre nenasýtené prúdenie. Využijeme aj niektoré teoretické výsledky z [16], kde je dokázaná konvergencia metódy založenej na metóde charakteristík (pre podobný problém, ale bez adsorbčného člena a štiepenia operátora).

## 2. Fyzikálna podstata metódy

Problém transportu kontaminantu a nenasýteného prúdenia by sme mohli zaradiť k problémom environmentalistiky. Stačí si predstaviť situáciu s povodňami, kedy sa na povrchu zeme vytvorí istá hladina vody. Táto voda nevsiakne okamžite do pôdy, ale vsakuje postupne. Ešte zložitejší je problém, keď si predstavíme, že voda, ktorá vsakuje, nie je čistá, ale kontaminovaná napríklad hnojivami alebo inými škodlivými, vo vode rozpustnými látkami. V prírode máme veľké zásoby podzemných vôd, ktoré by sme chceli zachovať čisté. Predpovedať kedy, v akom množstve a ako veľmi kontaminovaná voda eventuálne dosiahne hladinu podzemných vôd je dôležitá otázka, ktorá je úzko spätá s riešením nášho problému. Okrem vsakovania (saturovania) vody do pôdy sa mení aj koncentrácia kontaminantu vo vode a množstvo kontaminantu zachyteného v pôde. Táto koncentrácia sa mení najmä

vplyvom pohybu vody (tzv. transport), difúziou (v našom prípade uvažujeme molekulárnu difúziu aj hydrodynamickú disperziu) a adsorpciou (teda naväzovaním kontaminantu na pevnú zložku pôdy).

V prírode sa všetky tieto deje – vsakovanie vody, transport kontaminantu, difúzia a adsorpcia – odohrávajú naraz, simultánne. Preto jeden z možných prístupov je snažiť sa nájsť numerickú aproximáciu riešenia naraz pre všetky premenlivé veličiny – množstvo vsiaknutej vody, koncentrácie vo vode a adsorbovanej látky. My však volíme iný prístup. Sila (a v istom zmysle aj slabina) našej numerickej aproximácie spočíva v tom, že v malých časových intervaloch tieto deje od seba oddelíme, najskôr uvažujeme iba prúdenie, potom transport a difúziu a nakoniec adsorpciu. (Schéma metódy je na obrázku vpravo). Uvažujúc nejaký počiatočný stav v čase  $t_k$  nás zaujíma riešenie v čase  $t_{k+1}$  (rozdiel v časoch označme  $\Delta t$ ).

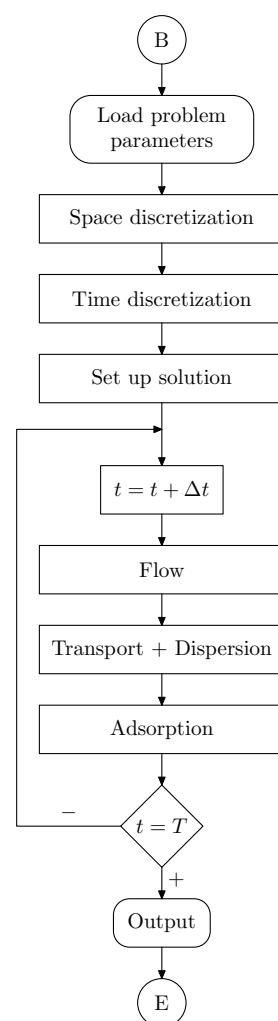
V prvej fáze za tento malý časový interval  $\Delta t$  zistíme, aké zmeny sa udiali v saturácii. Teda vypočítame, kam všade sa dostala voda a v akom množstve, pričom v tomto momente nás nezaujíma, ako sa zmenila koncentrácia či množstvo adsorbovanej látky. Hodnoty koncentrácie aj adsorbovanej látky ponecháme nezmenené.

Keď už vieme, kde všade je voda, tak v druhej fáze zistíme, aký veľký vplyv má na zmenu koncentrácie vo vode transport a difúzia. Teda zanedbáme všetky ostatné deje, ktoré sa môžu v prostredí diať a uvažujeme iba transport a difúziu pri novom profile vody v pôde. Tieto procesy budeme uvažovať opäť v časovom intervale dĺžky  $\Delta t$ .

Na záver, v tretej fáze procesu, budeme za čas  $\Delta t$  uvažovať iba proces adsorbovania, čiže výmeny kontaminantu medzi vodou a pôdou. Pritom už berieme do úvahy nový profil vody vypočítaný v prvej fáze a nové hodnoty koncentrácie kontaminantu, vypočítané v druhej fáze.

Všetky tri spomínané procesy sa v spomínanej numerickej aproximácii dejú za čas  $\Delta t$ . Vyššie popísaným spôsobom teda zistíme hodnoty skúmaných veličín v čase  $t_{k+1}$  a podobným spôsobom postupujeme ďalej až do času  $T$ , v ktorom skúmame priebeh celého procesu. Konečným výsledkom v čase  $t_{k+1}$  budú hodnoty saturácie vypočítané v prvej fáze, hodnoty koncentrácie vypočítané v tretej fáze a hodnoty adsorbovanej látky vypočítané v tretej fáze. Takúto aproximáciu nazveme aproximáciou pomocou štiepenia operátora.

Fyzikálna podstata metódy štiepenia operátora teda spočíva v oddelení jednotlivých procesov od seba. Veľmi dôležitá otázka ale je, nakoľko blízka je takto vypočítaná aproximácia skutočným hodnotám, resp. či daná metóda konverguje k riešeniu pôvodného problému.



### 3. Model a metóda štiepenia operátora

Ako sme už spomínali, model pre prúdenie kontaminantu v pórovitom prostredí je modelovaný pomocou pomerne zložitého systému PDE. Prúdenie v nasýtenom prostredí je dané Darcyho rovnicou, v nenasýtenom Richardsonovou silne nelineárnou rovnicou. V našej práci sa venujeme najmä oblasti, kde nemáme nasýtenú zónu a takisto aj dôkaz konvergencie k riešeniu je pre takúto oblasť.

Po Kirchhoffovej transformácii v rovnici pre nenasýtené prúdenie dostávame nižšie uvedený systém, kde funkcia  $u$  je viazaná s hodnotou saturácie  $\theta$  (množstvo vody v jednotkovom objeme pórovitého prostredia,  $b(u) = \theta$ ), funkcia  $w$  predstavuje percentuálne množstvo kontaminantu v jednotke objemu vody (resp. inej tekutiny) a  $S$  predstavuje percentuálne množstvo kontaminantu viazaného na jednotku hmoty v pórovitom prostredí.

Teda riešime viazaný systém časovo aj priestorovo závislých funkcií  $[u, w, S]$  tvaru

$$\text{(nenasýtené prúdenie)} \quad \partial_t b(u) + \operatorname{div}_z F(x, u) - \operatorname{div} \mathbf{A}(x) \nabla u = 0,$$

$$\text{(transport, difúzia, adsorpcia)} \quad b(u) \partial_t w + v(u, \nabla u) \cdot \nabla w - \operatorname{div}(D(u, \nabla u) \nabla w) = -\partial_t S,$$

$$\text{(kinetika adsorpcie)} \quad \partial_t S = \kappa(\Psi(w) - S),$$

pre  $(t, x) \in I \times \Omega = Q_T$ ,  $I = (0, T)$ ,  $T < \infty$  s okrajovými podmienkami

$$u = u^D \quad \text{na } I \times \partial\Omega,$$

$$w = w^D \quad \text{na } I \times \Gamma_1, \quad \text{a} \quad -D(u, \nabla u) \nabla w \cdot \nu = 0 \quad \text{na } I \times \Gamma_2$$

na hranici oblasti  $\Omega$ . Počiatočné podmienky sú

$$u = u_0, \quad w = w_0, \quad S = S_0 \quad \text{na } \{0\} \times \Omega.$$

V uvedenom systéme poznáme (resp. vieme numericky aproximovať) všetky funkcie okrem  $u, w, S$ , ktoré sa snažíme vypočítať. Riešenie systému budeme hľadať pomocou metódy štiepenia operátora po časovej a priestorovej diskretizácii (v 1D). Teda uvažujeme ekvidištantné delenie intervalu  $(0, T)$   $n_T$  bodmi, a takisto priestorové delenie intervalu  $(0, 1)$   $n_x$  bodmi. Sledujúc myšlienku načrnutú v predchádzajúcej kapitole definujeme numerickú aproximáciu riešenia nasledovne:

V časovom intervale  $(t_k, t_{k+1})$  postupne vyriešime tri podproblémy (prislúchajúce trom spomínaným fázam). Z predchádzajúceho kroku vypočítanú aproximáciu riešenia v čase  $t_k$  označíme  $u^k, w^k, S^k$ :

1. Podproblém – nenasýtený tok:

Z predchádzajúceho výpočtu poznáme  $u^k, w^k, S^k$ . Hodnotu  $u^{k+1}$  získame riešením aproximácie rovnice pre nenasýtené prúdenie, teda

$$(3.1) \quad \begin{aligned} & \frac{b(u_i^{k+1}) - b(u_i^k)}{\tau} \Delta x + F(x_i, u_{i+1}^{k+1}) - F(x_i, u_i^{k+1}) - \\ & - (A(x_{i+1})D_{i+1}u^{k+1} - A(x_i)D_i u^{k+1}) = 0, \\ & u_0^k = u^1(t_k) \quad \text{a} \quad u_{n_x}^k = u^2(t_k). \end{aligned}$$

2. Podproblém – transport a disperzia:

Z predchádzajúceho podproblému poznáme riešenie  $u^{k+1}$  a z predchádzajúceho kroku poznáme hodnoty  $w^k, S^k$ . Hodnotu  $w^{k+1/2}$  získame riešením rovnice pre transport a disperziu bez adsorpcie, teda

$$(3.2) \quad \begin{aligned} & b(u_i^{k+1}) \frac{w_i^{k+1/2} - w_i^k}{\tau} \Delta x + v(u_i^{k+1})(w_i^{k+1/2} - w_{i-1}^{k+1/2}) - \\ & - (d(u_{i+1/2}^{k+1})D_{i+1}w^{k+1/2} - d(u_{i-1/2}^{k+1})D_i w^{k+1/2}) = 0, \\ & w_0^k = C_0(t_k) \quad \text{a} \quad w_{n_x+1}^k = w_{n_x}^k. \end{aligned}$$

3. podproblém – adsorpcia: Z predchádzajúcich dvoch podproblémov poznáme hodnoty  $u^{k+1}, w^{k+1/2}, S^k$ . Hodnoty  $w^{k+1}, S^{k+1}$  získame numerickou aproximáciou rovnice pre adsorpciu, teda riešime ODR systém

$$(3.3) \quad \begin{aligned} & b(u(x_i)) \partial_t w_i^{k+1} + \partial_t S_i^{k+1} = 0 \\ & \partial_t S_i = \kappa(\Psi(w_i) - S_i). \end{aligned}$$

Rovnice (3.1), (3.2), (3.3) určujú numerickú schému, pomocou ktorej vieme vypočítať približné hodnoty  $u, w, S$  v diskretných bodoch  $(x_i, t_k)$  časopriestoru. Pri takto definovanej schéme môžeme voliť lokálne časové kroky v prípade tretieho podproblému – adsorpcie. Navyše podproblémy, ktoré riešime, sú oproti celému systému (teda systému bez štiepenia na jednotlivé fyzikálne procesy) oveľa menšie a preto aj menej numericky náročné. Takisto môžeme na riešenie každého z podproblémov zvoliť vhodnejšiu a presnejšiu metódu ako je uvedená hrubá diferenčná schéma (napríklad zvoliť diskretizáciu v priestore a riešiť v každom kroku systém ODR rovníc). Konvergenciu k slabému riešeniu však ukážeme pre takúto numerickú aproximáciu.

Pre takto definovanú numerickú aproximáciu riešenia je veľmi podstatnou otázkou konvergencia k riešeniu. Vo všeobecnosti nevieme zaručiť, či aproximované hodnoty vypočítané danou numerickou schémou a lineárne dedefinované funkcie budú spĺňať pôvodné originálne rovnice (pred nahradením derivácií diferenciami, pred štiepením). Nám však stačí konvergencia k slabému riešeniu danej úlohy.

**Definícia 3.4.** Majme funkcie  $\Phi(x, t), \zeta(x, t), \vartheta(x, t) \in C^\infty(\Omega \times (0, T))$ , ktoré sú rovné 0 v okolí bodov  $(0, 1)$  pre všetky  $t$ . Navyše, nech platí  $\Phi(0, t) = \Phi(1, t) = 0$ ,  $\Phi(x, T) = 0$ ;  $\zeta(0, t) = 0$ ,  $\zeta(x, T) = 0$  a  $\vartheta(x, T) = 0$ . Potom variačným (slabým) riešením systému pre nenasýtené prúdenie s transportom kontaminantu a adsorpciou nazveme  $u, w, S$ , pre ktoré platí

$$(3.5) \quad \int_0^T \int_0^1 -b(u)\partial_t \Phi dx dt - \int_0^T \int_0^1 F(x, u)\partial_x \Phi dx dt + \\ + \int_0^T \int_0^1 A(x)\partial_x u \partial_x \Phi dx dt = \int_0^1 b(u_0)\Phi(x, 0) dx.$$

$$(3.6) \quad \int_0^T \int_0^1 (-w\partial_t(b(u)\zeta) + v(u)\partial_x w\zeta + d(u)\partial_x w\partial_x \zeta - S\partial_t \zeta) dx dt = \\ = \int_0^1 b(u(x, 0))w(x, 0)\zeta(x, 0) dx + \int_0^1 S(x, 0)\zeta(x, 0) dx.$$

$$(3.7) \quad \int_0^T \int_0^1 (S\partial_t \vartheta + \kappa(\Psi(w) - S)\vartheta) dx dt = - \int_0^1 S(x, 0)\vartheta(x, 0) dx.$$

Ako sme už spomenuli, pomocou približných hodnôt  $u^k, w^k, S^k$  vieme dedefinovať po častiach lineárnu aproximáciu riešenia  $u^n, w^n, S^n$  vo všetkých bodoch  $\Omega_T$ . Hodnoty  $u_\nu$  definujeme priamo ako Rotheho-Galerkinovu funkciu na intervale  $t_k, t_{k+1}$ , pre všetky  $t_k$ . Kvôli štiepeniu definujeme

$$w_\nu(v, t) = \begin{cases} w_R^{k+1/2}(t_k + 2(t - t_k)) & t \in (t_k, t_{k+1/2}), \\ w_R^{k+1}(t_k + 2(t - t_{k+1/2})) & t \in (t_{k+1/2}, t_{k+1}), \end{cases}$$

kde  $w_R^{k+1/2}$  predstavuje riešenie rovnice pre transport a difúziu na intervale  $(t_k, t_{k+1})$ , ale po výpočte stiahnuté na interval polovičnej dĺžky. Podobne  $w_R^{k+1}$  predstavuje riešenie rovnice pre adsorpciu na intervale  $(t_k, t_{k+1})$ , ale po výpočte modifikované na interval polovičnej dĺžky.

Podobne dedefinujeme aj funkciu  $S_\nu$ :

$$S_\nu(v, t) = \begin{cases} S_R^k, & t \in (t_k, t_{k+1/2}), \\ S_R^{k+1}, & t \in (t_{k+1/2}, t_{k+1}), \end{cases}$$

teda v intervale  $(t_k, t_{k+1/2})$  je konštantná a  $S_R^{k+1}$  v intervale  $(t_{k+1/2}, t_{k+1})$  predstavuje riešenie rovnice pre adsorpciu, ale po výpočte modifikované na interval polovičnej dĺžky.

Využitím myšlienky M. G. Crandala a A. Majdu ([4]) vieme dokázať, že takto definované  $u_\nu, w_\nu, S_\nu$  konvergujú k slabému riešeniu  $u, w, S$  definovanému vyššie. Oproti prácam [24], [12], [7] však vieme dokázať konvergenciu v priestore  $L_2(I, V)$ , čo zaručuje aj

konvergenciu na hranici oblasti. V týchto prácach sú odvodené odhady v  $L_1$  norme, ktoré konvergenciu na hranici nezaručujú.

Kľúčovým prvkom dôkazu konvergenzie je postupnosť pomerne náročných a priorných odhadov, potrebných na aplikáciu Kolmogorovho kritéria kompaktnosti (teda Arzelovej – Ascoliho lemy v  $L_p$  priestoroch). Štiepenie operátora v niektorých miestach dôkazov komplikuje situáciu a často vyžaduje veľmi jemnú manipuláciu s rovnicami, z ktorých pri dôkazoch vychádzame.

Silnejšie výsledky sa nám podarilo ukázať najmä vďaka tomu, že oproti metódam štiepenia operátora v prácach [7], [12] sme neoddelili štiepením od seba konvektívny, teda transportný člen ( $v(u, \nabla u) \cdot \nabla w$ ) a eliptický, teda difúzny člen ( $\text{div}(D(u, \nabla u) \nabla w)$ ). V predchádzajúcich prácach sa práve "vďaka" tomuto rozdeleniu nepodarilo získať silnejšie odhady.

V nasledujúcej časti uvádzame a priori odhady z ktorých vyplýva konvergencia našich aproximácií v priestore  $L_2(I, L_2)$ . Z princípu maxima vo vhodnej podobe sa nám podarilo dokázať nasledujúce lemy:

**Lema 3.8.** *Riešenie  $u^{k+1}$  získané metódou štiepenia operátora je ohraničené v  $L_\infty$ , teda*

$$\|u^{k+1}\|_\infty \leq \max(C, |u^1(t)|, |u^2(t)|), \quad t \in \langle O, T \rangle$$

prícom  $C \in \mathbb{R}^+$  je konštanta nezávislá na priestorovej a časovej diskretizácii a  $u^1, u^2$  sú okrajové podmienky.

**Lema 3.9.** *Nech  $w^{k+1/2}$  je riešenie získané metódou štiepenia operátora. Potom*

$$\|w^{k+1/2}\|_\infty \leq \max\{\|w^k\|_\infty, C\}, \quad C = \max_t \{C_0(t)\}, t \in \langle t_k, t_{k+1} \rangle.$$

S využitím Gronwallovej lemy dostávame nasledujúci odhad:

**Lema 3.10.** *Nech  $w^{k+1}$  a  $S^{k+1}$  vypočítame z (3.3). Potom platí*

$$\|w^{k+1}\|_\infty + \|S^{k+1}\|_\infty \leq C,$$

kde  $C \in \mathbb{R}^+$  je konštanta nezávislá na časovej a priestorovej diskretizácii.

Týmto spôsobom dostávame predpoklad ohraničenosti v Kolmogorovom kritériu kompaktnosti. Chýbajú predpoklady rovnomocnej spojitosti v strede, ktoré vieme získať využitím odhadov v  $L_2$  norme na derivácie získaných riešení. A priori odhady pre derivácie  $u$  sú štandardné, keďže v rovnici pre nenasýtené prúdenie štiepenie nemáme.

**Lema 3.11.** *Pre všetky delenia  $n_x$  a  $n_T$  platí a priori odhad*

$$\sum_{k=1}^{n_T} \tau \sum_{i=1}^{n_x} (D_i u^k)^2 \Delta x \leq C,$$

prícom  $C \in \mathbb{R}^+$  je konštanta nezávislá na časovej a priestorovej diskretizácii.

Podobne dostaneme odhad na časovú deriváciu:



**Lema 3.12.** *A priorný odhad*

$$\sum_{k=1}^r \tau \sum_{i=1}^{n_x-1} \left( \frac{b_i^k - b_i^{k-1}}{\tau} \right)^2 \Delta x \leq C$$

platí pre všetky delenia  $n_x$  a  $n_T$ .

Komplikovanejšia situácia nastáva pri odhade derivácii funkcie  $w$ . V rovnici pre transport kontaminantu s difúziou a adsorbpciou máme štiepenie, preto treba najskôr odhadnúť derivácie vo  $w^{k+1/2}$  a potom pre  $w^{k+1}$ :

**Lema 3.13.** *A priorný odhad*

$$\sum_{k=0}^{n_T-1} \tau \sum_{i=1}^{n_x} (D_i w^{k+1/2})^2 \Delta x \leq C,$$

platí uniformne pre všetky  $n_x$  a  $n_T$ .

Jeden z najťažších dôkazov je odhad na priestorovú deriváciu  $w^{k+1}$ :

**Lema 3.14.** *A priorný odhad*

$$\sum_{k=0}^{n_T} \tau \sum_{i=1}^{n_x} (D_i w^{k+1})^2 \Delta x \leq C$$

platí pre všetky  $n_x$  a  $n_T$ .

Najslabší, ale stále dostatočný odhad sa nám podarí urobiť na časovú deriváciu  $w^k$ . V skutočnosti nevieme dokázať podobný odhad ako v predchádzajúcich dvoch lemach, ale vieme ukázať odhad na súčin  $b(u^{k+1})w^{k+1}$ . Tento odhad bude postačujúci a s jeho využitím dokážeme, že postupnosť  $\{b(u_i^k)w_i^k\}$  je kompaktná v  $L_2(I, L_2)$ . Keďže z predchádzajúceho vieme, že postupnosť  $\{b(u_i^k)\}$  je kompaktná a  $b(\cdot) > c > 0$ , dostaneme z toho aj kompaktnosť postupnosti  $\{w_i^k\}$ .

**Lema 3.15.** *A priorný odhad*

$$\sum_{j=1}^{n_T-p} \tau \sum_{i=1}^{n_x} (b_i^{p+j} w_i^{p+j} - b_i^j w_i^j)^2 \Delta x \leq C\tau p,$$

platí pre všetky  $n_x$  a  $n_T$ , pričom  $C$  je konštanta nezávislá od priestorovej a časovej diskretizácie a  $p \in \mathbb{N}$ .

S využitím predchádzajúcich liem sme, odvolávajúc sa na Kolmogorove kritérium, dokázali konvergenciu približných riešení pre  $\delta x \rightarrow 0$  a  $\Delta T \rightarrow 0$  v  $L_2(I, L_2)$ . V práci dokazujeme konvergenciu aj v  $L_2(I, V)$ , ktorá je nutná pri dokazovaní konvergenzie k slabému riešeniu celého problému.

Všetky odhady, ktoré sme dokázali pre diskrétny hodnoty  $u_i^k, w_i^k, S_i^k$ , sa prenesú aj na funkcie  $u_\nu, w_\nu, S_\nu$ , ktoré sme definovali vyššie. Kovergencia týchto aproximácií k slabému riešeniu je založená na spomínanej myšlienke M. G. Crandala a A. Majdu.

## 4. Numerické modelovanie problému

Na záver uvádzame niekoľko výsledkov vypočítaných pomocou metódy štiepenia operátora. Aproximačná schéma pre numerické experimenty sa od uvedenej hrubej diferenčnej schémy (3.1), (3.2), (3.3) líši v tom, že v každej fáze procesu za čas  $\Delta t$  úlohu diskretizujeme v priestore a tým získavame systém ODR (na rozdiel od nelineárneho systému, ktorý sme mali predtým). Takáto diskretizácia umožňuje v každom časovom kroku  $\Delta t$  zvoliť pre jednotlivé fázy lokálny (a menší) časový krok a zrátať tak aproximáciu riešenia v čase  $t_{k+1}$  s väčšou presnosťou. Na riešenie systémov ODR sme použili software Matlab a solver ode15s.

V numerickom experimente modelujeme proces saturovania a zmien v koncentrácii kontaminantu vo vode pre vertikálnu vzorku pórovitého prostredia. Na vrchu pôdy máme istú zásobu kontaminovanej vody výšky  $l(0)$  a nejaká voda je vsiaknutá do prostredia. V prostredí vzniká saturovaná oblasť s hranicou  $s_1(0)$  (oddeľuje hranicu plne saturovanej oblasti od čiastočne saturovanej oblasti), čiastočne nasýtená oblasť s hranicou  $s_2(0)$  (oddeľuje čiastočne nasýtenú oblasť od nenasýtenej oblasti) a nenasýtená oblasť. Na základe [26] môžeme pomocou ODR modelovať aj zmeny  $s_1(t)$ ,  $s_2(t)$  a  $l(t)$ . Systémy ODR pre zostávajúce dve fázy (transport + difúzia, adsorpcia) získame priestorovou diskretizáciou príslušných rovníc.

Numerická aproximácia s využitím ODR pozostáva v každom kroku z troch fáz:

### 1. PODPROBLÉM PRÚDENIA

Keďže rovnica štiepenia operátora nijako "neštiepi" rovnicu pre prúdenie, môžeme tento podproblém riešiť priamo. Prvým krokom numerickej aproximácie rovnice pre prúdenie je transformácia nenasýtenej oblasti  $s_1(t)$ ,  $s_2(t)$  na interval  $(0, 1)$ . Diskretizácia v priestore v uzlových bodoch  $0 = y_0 < y_1 < \dots < y_i < \dots < y_N = 1$  ( $\alpha_i = y_i - y_{i-1}$ ) vedie na systém ODR rovníc

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{S}_i = & \frac{2K_s}{(\alpha_i + \alpha_{i+1})(\theta_s - \theta_r)(s_2 - s_1)^2} [D_{i+1/2} \partial_y \tilde{S}_i^+ - D_{i-1/2} \partial_y \tilde{S}_i^- - \\ & - (s_2 - s_1)(k_{i+1/2} - k_{i-1/2})] + \frac{1}{s_2 - s_1} (\dot{s}_1(1 - y_i) + \dot{s}_2 y_i) \partial_y L_i(y)|_{y=y_i}, \end{aligned}$$

kde  $\tilde{S}$  predstavujú hodnoty efektívnej saturácie na intervale  $(0, 1)$ . Parametre  $n > 1$ ,  $m = 1 - 1/n$  a  $\gamma < 0$  sú parametre charakterizujúce vlastnosti pôdy.  $D$  je silne nelineárna funkcia tvaru:

$$D(S) = \frac{-1}{(n-1)\gamma} S^{1/2-1/m} (1 - S^{1/m})^{-m} \left(1 - (1 - S^{1/m})^m\right)^2,$$

ktorej vlastnosti zaručujú, že rozhranie  $s_2(t)$  medzi suchou vzorkou a čiastočne nasýtenou vzorkou postupuje konečnou rýchlosťou a dá sa popísať ODR. Ďalej  $K_s$  označuje konduktivitu v plne nasýtenom prostredí,  $\theta_s$ ,  $\theta_r$  je plná a reziduálna saturácia a funkcia  $k$  je Van Genuchtenov vzťah popisujúci konduktivitu v nenasýtenom prostredí:

$$k(S) = S^{\frac{1}{2}} (1 - (1 - S^{\frac{1}{m}})^m)^2.$$

$L_i$  označuje Lagrangov polynóm prechádzajúci bodmi  $(y_{i-1}, \tilde{S}_{i-1})$ ,  $(y_i, \tilde{S}_i)$  and  $(y_{i+1}, \tilde{S}_{i+1})$ .

Uvedený systém treba doplniť o rovnice popisujúce zmeny vo výške hladiny vody na povrchu vzorky  $l(t)$  a pohyb jednotlivých hraníc  $s_1(t)$  a  $s_2(t)$ . Rovnica popisujúca pohyb hranice  $s_1(t)$  vyplýva zo zákona zachovania masy a platí

$$\dot{s}_1(t) = q(t) - q_{\text{int}}(t),$$

kde  $q(t)$  označuje tok na začiatku v nasýtenej oblasti

$$q(t) = -K_s(\partial_x h - 1) = K_s \left( \frac{l(t)}{s_1(t)} + 1 \right),$$

a  $q_{\text{int}}$  označuje tok na začiatku nenasýtenej (tok v bode  $y = 0$  vyjadríme pomocou  $h$ , keďže  $\lim_{S \rightarrow 1} D(S) = +\infty$ ):

$$q_{\text{int}} \approx \frac{K_s}{(s_2(t) - s_1(t))(\theta_s - \theta_r)} (\partial_y L_h(y)|_{y=0} - 1),$$

Pre výšku hladiny  $l(t)$  dostávame

$$\dot{l}(t) = -q(t).$$

Pohyb hranice  $s_2(t)$  je určený vzťahom

$$\dot{s}_2(t) = \frac{-K_s m^2}{p(\theta_s - \theta_r)\gamma(n-1)} \frac{1}{s_2(t) - s_1(t)} \partial_x \tilde{S}(1, t)^p,$$

kde  $p = \frac{1}{2} + \frac{1}{m}$  a jeho numerická aproximácia

$$\dot{s}_2(t) \approx \frac{-K_s m^2}{p(\theta_s - \theta_r)\alpha(n-1)(s_2(t) - s_1(t))} (\partial_y L_{N-1}(y)|_{y=1})^p.$$

Riešením tohto problému získame hodnoty saturácie, tlaku a toku v oblasti  $0, s_2(t)$ .

## 2. PODPROBLÉM TRANSPORTU KONTAMINANTU S DIFÚZIOU.

V intervale  $(t_k, t_{k+1})$  riešime konvekčno - difúznú úlohu

$$\theta(t_{k+1})\partial_t w + v(\theta(t_{k+1}), \nabla\theta(t_{k+1})) \cdot \nabla w - \text{div}(D(\theta(t_{k+1}), \nabla\theta(t_{k+1}))\nabla w) = 0$$

Aproximujeme ju v uzlových bodoch  $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_i < \dots < x_{n_x} = s_2(t_{k+1})$  ( $\alpha_i = x_i - x_{i-1}$ ) pomocou metódy konečných diferencií.

$$\theta_i \partial_t w_i + v_i D_i w - \frac{2(d_{i+1/2} D_{i+1} - d_{i-1/2} D_i)}{(\alpha_i + \alpha_{i-1})} = 0,$$

pre  $i = 1, \dots, N-1$ . Vyriešením predchádzajúceho podproblému zistíme hodnoty saturácie  $\theta_i = \theta(x_i, t_{k+1})$  pre  $i = 0, \dots, N$ . Difúzia  $d_{i-1/2} = D(\theta_{i-1/2}, \nabla\theta_{i-1/2})$  a tok  $v_i := v(\theta_i, \nabla\theta_i)$ . Sledujúc myšlienku metódy štiepenia operátora, riešenie tohto systému v čase  $t_{k+1} = t_k + \tau$  vstupuje do ďalšej fázy ako počiatočná podmienka pre koncentráciu a označujeme ho  $w^{k+1/2}$ .

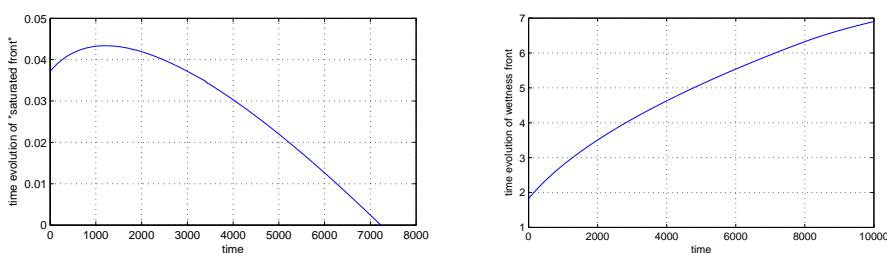
### 3. PODPROBLÉM ADSORPCIE

V každom deliacom uzle  $x_i$  intervalu  $(0, s_2(t_{k+1}))$  prepíšeme systém pre adsorpciu do tvaru

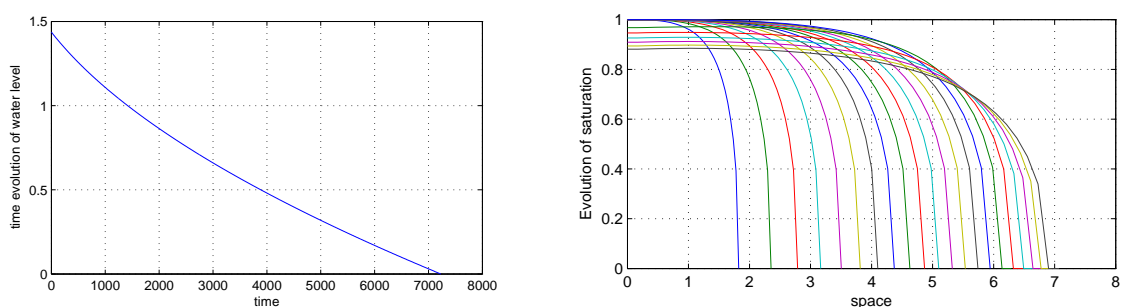
$$\begin{aligned}\theta_i \partial_t w_i &= -\theta_n \kappa(\Psi(w_i) - S_i) \\ \partial_t S_i &= \kappa(\Psi(w_i) - S_i),\end{aligned}$$

s počiatočnou podmienkou  $S_0 = S(t_k)$  a  $w_0 = w^{k+1/2}$ . V každom uzle  $x_i$  tak dostávame jednu ODR pre koncentráciu  $w$  a druhú pre adsorpciu  $S$ . Výhoda zvolenej aproximácie je v tom, že solver volí vhodný časový krok pre rôzne  $\kappa$ . Koeficient  $\kappa$  popisuje rýchlosť adsorpcie, čím je väčší, tým musí byť časový krok menší. Takýmto spôsobom získavame aproximáciu skutočných hodnôt koncentrácie v čase  $t_{k+1}$ , ktorú označíme  $w^{k+1} = w(\tau)$ ,  $S^{k+1} = S(\tau)$ .

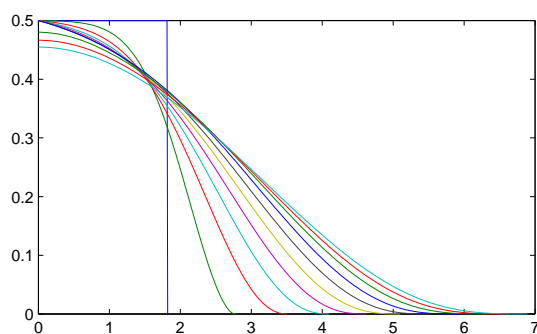
Na záver prikladáme niekoľko experimentov ilustrujúcich výsledky riešenia priamej úlohy. Pre dostatočne malý časový krok sa riešenia od seba takmer vôbec nelíšia. Čo by mohlo znamenať, že riešenie získané metódou štiepenia operátora konverguje k slabému riešeniu aj v prípade nenasýtenej/nasýtenej zóny.



OBR. 1. *Priebeh frontu  $s_1(t)$  a  $s_2(t)$  za čas  $T = 10^5$ .*



OBR. 2. *Graf popisujúci zmeny hladiny  $l(t)$  a priebeh efektívnej saturácie  $S$ ,  $T = 10^5$ .*



OBR. 3. Graf popisujúci zmeny koncentrácie kontaminantu vo vode pri  $\kappa = 1$ .

## 5. Zoznam prác dizertanta

- [1] J.Kačur, B. Malengier, E. Trojáková. Numerical modelling of convection-diffusion-adsorption problems in 1D using dynamical discretization. Chemical Engineering Science, Volume 65, Issue 7, 2301-2309, 2010.
- [2] Erika Trojáková. Metóda pohyblivých bodov pre úlohu transportu kontaminantu. Sborník příspěvku semináře, SIMoNA. 145-151, 2009.

Výsledky boli ústne prezentované na konferenciách:

- Simulace, modelování a nejruznejší aplikace, SIMONA 2009, Technická univerzita v Liberci, september 2009.
- 7th International Conference on diffusion in solids and liquids, Portugal, jún 2011.

## 6. Zoznam literatúry použitej v práci

- [1] J. Bear, A. H.-D. Cheng. Modeling Groundwater Flow and Pollution, D. Reidel Publishing Company 1987, ISBN 1-55608-015-8
- [2] J. Bear, A. H.-D. Cheng, Modeling Groundwater flow and Contaminant Transport, Springer, ISBN 978-1-4020-6681-8
- [3] K. Spitz, J. Moreno. A Practical Guide to Groundwater and Solute Transport Modeling. John Wiley and Sons. inc., ISBN 0-471-13687-5
- [4] M. G. Crandal, A. Majda. The method of fractional steps for conservation laws. Numer. Math. 34:285-314. 1980
- [5] J. Kačur. Numerické meódy riešenia parciálnych diferenciálnych rovníc. 2004
- [6] D. Constales, J. Kačur, B. Malengier. A precise numerical scheme for contaminant transport in dual well flow. Water Resources Research, Vol. 39, No. 10, 1303, 2003.
- [7] M. Remešíková. Numerical Solution of direct and inverse contaminant transport problems with adsorption. PhD. thesis. 2005.
- [8] A. Ralston. Základy numerické matematiky. Academia Praha. 1973.
- [9] K. H. Karlsen, N. H. Risebro. An operator splitting method for nonlinear convection-diffusion equations. Numer. Math., Vol. 77, No. 3, 365 – 382, 1997.
- [10] J.Kačur, B. Malengier, E. Trojáková. Numerical modelling of convection-diffusion-adsorption problems in 1D. Mathematical Modelling and Numerical Analysis.
- [11] J. Kačur, B. Malengier, R. Van Keer, On the Mathematical Analysis and Numerical Approximation of a System of Nonlinear Parabolic PDEs, Journal for Analysis and its Applications, Vol. 28, 305-332, 2009.
- [12] B. Malengier. On numerical methods for direct and inverse convection-diffusion problems. Ghent. 2006.

- [13] M. Th. van Genuchten A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*44, 892-898, 1980.
- [14] H. Holden, N. H. Risenbro. A method of fractional steps for scalar conservation laws without the CFL condition. *Mathematics of computation*, Vol. 60, No. 201, 221-232, 1993.
- [15] J. Dieudonné. *Foundations of modern analysis*. Academic Press, 1960.
- [16] J. Kačur, B. Malengier, R. Van Keer. On the mathematical analysis and numerical approximation of a system of nonlinear parabolic PDEs. *Journal for analysis and its applications*, Vol. 28, 305-332, 2009.
- [17] E. Hairer, G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations II*. Springer Verlag 1991.
- [18] K. Dekker, J. Verwer. *Stability of Runge -Kutta Method for Stiff Nonlinear Differential Equations*. North-Holland. 1984.
- [19] H. A. van der Vorst. *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*, Cambridge University Press. 2003.
- [20] J .R. Dormand. *Numerical methods for differential equations: Computational approach*, University of Teeside. 1996.
- [21] O. Pironneau, *Num. Math.* 38, 871 - 885. 1982.
- [22] J.Kačur, R. van Keer. Solution of contaminant transport with adsorption in porous media by the method of characteristics. *M2AN*,35(5), 981-1006. 2001.
- [23] J.Kačur, B. Malengier, E. Trojáková. Numerical modelling of convectiondiffusionadsorption problems in 1D using dynamical discretization. *Chemical Engineering Science*, Vol. 65, Issue 7, 2301-2309, 2010.
- [24] J.Kačur, B. Malengier, M. Remešiková. Convergence of operator splitting method on a bounded domain for a convection-diffusion-reaction system. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*.
- [25] E. Trojáková. Metóda pohyblivých bodov pre úlohu transportu kontaminantu. *Sborník příspěvků semináře, SIMoNA*. 2009.
- [26] J. Kačur, B. Malengier, P. Kišon. Numerical modelling of unsaturated-saturated flow under centrifugation with no outflow. *arXiv:1001.1070v1[physics.comp-ph]*, Submitted, 2009.
- [27] D. Constales, J. Kačur. Determination of soil parameters via the solution of inverse problems in infiltration. *Computational Geosciences*. 5, 25-46, 2004.
- [28] J. Kačur, B. Malengier, M. Remešiková. Convergence of operator splitting method on a bounded domain for a convection-diffusion-reaction system. *Journal of mathematical analysis and applications*, Vol. 348, Issue 2, 894-918, 2008.

## 7. Summary

In this thesis we study the method of operator splitting used for approximation of solution of unsaturated flow in porous medium and contaminant transport with dispersion and adsorption. Problem of contamination in porous media is very complicated. We can consider the situation, when the water is contaminated with pollutant such as fertilizers. The dissolved contaminant is carried by the infiltrating water as it moves. During the movement various phenomena, e.g. transport, dispersion, take place. The ability to forecast the movement and accumulation of contaminant in the unsaturated zone is required.

The operator splitting method is based on the splitting of the physical processes in this problem. In nature all the processes – flow, transport, dispersion and adsorption happen at once. In our approximation we first solve the problem of flow in each time step, then proceed with transport and diffusion and in the last step we solve the adsorption problem.

This gives us an approximation of solution. For this approximation we show convergence to the weak solution of the original problem. The proof is based on a priori estimates in  $L_\infty$  and  $L_2(I, L_2)$ . Having proved this a priori estimates we are able to prove the convergence to the weak solution using the idea of Crandal and Majda ([4]).