UNIVERZITET U BEOGRADU Matematički fakultet

Milan D. Dotlić

Proračun podzemnog toka metodom konačnih zapremina

- Doktorska disertacija -

Beograd, 2015.

UNIVERSITY OF BELGRADE Faculty of Mathematics

Milan D. Dotlić

Computation of subsurface flow using finite volume method

- PhD thesis -

Belgrade, 2015.

Podaci o mentoru i članovima komisije

Mentor:

dr Boško Jovanović redovni profesor Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet

Komentor: dr Dragan Vidović Naučni saradnik Institut "Jaroslav Černi"

Članovi komisije: dr Boško Jovanović redovni profesor Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet

dr Desanka Radunović vanredni profesor Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet

dr Dragan Vidović Naučni saradnik Institut "Jaroslav Černi"

Datum odbrane:

Ovom prilikom zahvalio bih se prof. dr Desanki Radunović, koja me je uvela u problematiku numeričkog rešavanja parcijalnih diferencijalnih jednačina, na korisnim sugestijama i svesrdnoj pomoći tokom doktorskih studija.

Zahvalio bih se i prof. dr Bošku Jovanoviću na mnogim korisnim savetima tokom doktorskih studija, kao i na pažljivom čitanju preliminarnih verzija disertacije i detaljnim komentarima.

Neizmernu zahvalnost dugujem dr Draganu Vidoviću na uputstvima, savetima, strpljivom čitanju i diskusijama brojnih radnih verzija ove teze. Pored naučnog usmeravanja, ovom prilikom zahvalio bih mu se i na zajedničkom istraživanju prethodnih godina u Institutu "Jaroslav Černi".

Takođe, želeo bih da se zahvalim prof. dr Milanu Dimkiću, prof. dr Milenku Pušiću i dr Borisu Pokornom na korisnim diskusijama, kao i Institutu "Jaroslav Černi" na podršci i razumevanju tokom trajanja ovog doktorata.

Naposletku najveću zahvalnost dugujem svojoj porodici bez čije se motivacije i bezrezvne prodrške ne bih ni upustio u ovaj poduhvat.

> Beograd, 2015. Milan Dotlić

PRORAČUN PODZEMNOG TOKA METODOM KONAČNIH ZAPREMINA

Rezime

U disertaciji su razmatrane numeričke metode za rešavanje problema podzemnog strujanja, transporta mase i energije u anizotropnoj i deo po deo neprekidnoj sredini. Ovakvi problemi sreću se u hidrologiji, naftnoj industriji, ekologiji i drugim oblastima.

Podzemno strujanje u zasićenoj sredini opisano je linearnom parcijalnom diferencijalnom jednačinom, dok je u nezasićenoj sredini opisano Ričardsovom nelinearnom parcijalnom diferencijalnom jednačinom. Transport mase i energije opisan je advektivno-difuznim jednačinama.

U tezi je razmatrano nekoliko metoda konačnih zapremina za diskretizaciju difuznog i advektivnog terma. Predstavljena je interpolaciona metoda za diskretizaciju difuzije kroz diskontinualnu sredinu. Ova metoda je primenljiva u više nelinearnih shema konačnih zapremina.

Prisustvo bunara u podzemnoj sredini može imati veliki uticaj na podzemni tok. Standardne numeričke metode daju pogrešan proticaj i distribuciju hidrauličkog potencijala u bunaru i okolini. U tezi su predložene dve metode za popravku proticaja u bunaru od kojih je jedna drugog red tačnosti za hidraulički potencijal i prvog reda tačnosti za proticaj.

U radu su predstavljene eksplicitna i implicitna vremenska diskretizacija. Analizirano je očuvanje principa maksimuma i minimuma svih razmatranih shema.

Sve razmatrane sheme testirane su na numeričkim primerima koji potvrđuju izložene teorijske rezultate.

Ključne reči: metoda konačnih zapremina, parcijalne diferencijalne jednačine, Ričardsova jednačina, transport mase, transport energije, princip minimuma i maksimuma, nestrukturna mreža.

Naučna oblast: numerička matematika.

Uža naučna oblast: numeričke metode rešavanja parcijalnih diferencijalnih jednačina.

UDK broj: 519.63:556.3(043.3)

COMPUTATION OF SUBSURFACE FLOW USING FINITE VOLUME METHOD

Abstract

The thesis considers numerical methods for the computation of subsurface flow and transport of mass and energy in an anisotropic piecewise continuous medium. This kind of problems arises in hidrology, petroleum engineering, ecology and other fields.

Subsurface flow in a saturated medium is described by a linear partial differential equation, while in an unsaturated medium it is described by the Richards nonlinear partial differential equation. Transport of mass and energy is described by advectiondiffusion equations.

The thesis considers several finite volume methods for the discretization of diffusive and advective terms. An interpolation method for discretization of diffusion through discontinuous media is presented. This method is applicable to several nonlinear finite volume schemes.

The presence of a well in the reservoir determines the subsurface flow to a large extent. Standard numerical methods produce a completely wrong flux and an inaccurate hydraulic head distribution in the well viscinity. Two methods for the well flux correction are introduced in this thesis. One of these methods gives second-order accuracy for the hydraulic head and first-order accuracy for the flux.

Explicit and implicit time discretizations are presented. Preservation of the maximum and minimum principles in all considered schemes is analyzed.

All considered schemes are tested using numerical examples that confirm teoretical results.

Keywords: finite volume methods, partial differential equations, Richards equation, mass transport, energy transport, maximum and minimum principle, unstructured mesh.

Scientific field: numerical mathematics.

Scientific subfield: numerical methods for solving partial differential equations.

UDC number: 519.63:556.3(043.3)

Sadržaj

1	Uvod					
	1.1	Značaj podzemnog strujanja fluida	1			
	1.2	Modeliranje	3			
	1.3	Struktura i cilj disertacije	4			
2	Teorijske osnove					
	2.1	Osnovni geološki pojmovi	6			
	2.2	Darsijev zakon u zasićenoj sredini	7			
	2.3	Teorema o divergenciji	10			
	2.4	Održanje mase	11			
	2.5	Jednačina podzemnog strujanja u zasićenoj sredini	13			
	2.6	Kapilarne sile	14			
	2.7	Jednačina podzemnog strujanja u nezasićenoj sredini	15			
		2.7.1 Određivanje relativne propusnosti	17			
	2.8	Početni i granični uslovi	19			
	2.9	Postavka graničnog problema	20			
	2.10	Transport mase	21			
		2.10.1 Sorpcija i degradacija	24			
	2.11	Transport toplotne energije	26			
	2.12	Princip maksimuma i minimuma	29			
3	Diskretizacija stacionarne jednačine podzemnog strujanja					
	3.1	TPFA sheme	34			
		3.1.1 Linearna TPFA shema	34			

		3.1.2	Nelinearna TPFA shema	. 38					
		3.1.3	TPFA shema za fluks kroz materijalni diskontinuitet $\ .\ .\ .$. 43					
	3.2	Nelinearna MPFA shema							
	3.3	Uklanjanje diskontinuiteta na stranama lokalnom							
	koordinatnom transformacijom								
	3.4	Diskre	tizacija bunara	. 51					
		3.4.1	Analitičko rešenje	. 54					
		3.4.2	WFC korekcija	. 57					
		3.4.3	NWC korekcija	. 58					
		3.4.4	Korekcije u trodimenzionalnom slučaju	. 62					
	3.5	3.5 Diskretizacija Darsijevog fluksa izraženog preko pritiska							
	3.6	Nezasi	ićeni slučaj	. 65					
		3.6.1	Aproksimacija relativne propusnosti	. 66					
4	Diskretizacija stacionarnih jednačina transporta mase i								
	energije 70								
	4.1	Linear	rna diskretizacija advektivnog terma	. 71					
	4.2	Neline	earna diskretizacija advektivnog terma	. 73					
5	Rešavanje sistema nelinearnih jednačina 75								
	5.1	Pikarov metod							
	5.2	Njutnov metod							
6	Diskretizacija evolutivnih jednačina 79								
	6.1	Pikarov metod							
	6.2	Modif	ikovani Pikarov metod	. 83					
7	Numerički primeri								
8	Zak	ključak							
D	odata	ak A		114					
Dodatak B									

Literatura	118
Biografija	124

Glava 1

Uvod

1.1 Značaj podzemnog strujanja fluida

Podzemne vode podmiruju najveći deo potreba za pijaćom vodom u Evropi, kao i petinu svih svetskih potreba za vodom [11]. Pod podzemnim vodama podrazumevaju se sve vode ispod površine tla i one predstavljaju 97% ukupne količine sveže vode (ne računajući trajno zaleđene površine) [20]. Potreba za pijaćom vodom raste sa povećanjem broja stanovnika, sa druge strane promena klime dovodi do pojava poplava i suša koje utiču na kvalitet pijaće vode. Stoga će u narednom periodu upravljanje vodnim resursima predstavljati veliki izazov.

Geološka formacija koja sadrži vodu i dozvoljava njeno kretanje naziva se izdan. Podaci o nivou i kretanju vode kroz izdan dobijaju se putem merenja. Ovi podaci se sistematizuju u jednu opštu predstavu o podzemnom strujanju koja se naziva model i koja se može koristiti za predviđanje podzemnog strujanja.

Neke od primena modeliranja podzemnih voda su:

- Planiranje eksploatacije vode. Eksploatacija podzemne vode vrši se bunarima i kaptažama. Na osnovu rezultata modeliranja moguće je predvideti izdašnost bunara, npr. kao što je urađeno u [58].
- Remedijacija tla. Remedijacija predstavlja sanaciju tla posle zagađenja. Podrazumeva preduzimanje mera za zaustavljanje zagađenja i dovođenja sredine u stanje pogodno za ponovno korišćenje. Zagađenje može nastati iz

različitih razloga, kao što su ekološke nezgode, kontakt podzemnih voda sa biološkim, hemijskim ili nuklearnim otpadom, itd. Informacije o širenju i interakciji zagađenja u podzemnoj sredini neophodne u planiranju remedijacije mogu se dobiti modeliranjem.

- Intruzija slane vode. Crpljenje pijaće vode iz priobalnih izdani dovodi do pada pritiska u njima, što može dovesti do prodiranja morske vode i zaslanjivanja izdani. Kako bi se ovo izbeglo potrebno je pažljivo isplanirati eksploataciju priobalnih izdani za šta se koristi modeliranje.
- Korišćenje geotermalne energije. Modeliranje se između ostalog koristi za procenu gubitaka energije pri transportu, kao i za procenu obnavljanja geotermalnih izvora.
- U rudarstvu. U kopove rudnika dospevaju podzemne vode, pa je neophodno vršiti odvodnjavanje. Modeliranjem je moguće dobiti informacije o optimalnom postavljanju i režimu rada pumpi kako bi nivo podzemne vode bio ispod određene kote [68].
- U zaštiti od plavljenja. Snižavanjem nivoa podzemnih voda nekad je moguće izbeći poplave. Npr. drenaža na prostoru Kovin-Dubovac predstavlja primer snižavanja nivoa podzemnih voda radi zaštite od poplava. Modeliranjem se mogu dobiti podaci o tome koliko je potrebno sniziti nivo podzemne vode da ne bi došlo do poplave.
- U geotehnici. Dugotrajna i intenzivna eksploatacija podzemnih voda može dovesti do sleganja tla i do pojave klizišta. Npr. delovi Meksiko Sitija potonuli su i do 8.5 m usled prevelike eksploatacije podzemnih voda [33]. Modeliranjem se može predvideti zavisnost sleganja tla od eksploatacije podzemnih voda.
- U navodnjavanju. Skoro 90% globalne potrošnje vode se koristi za navodnjavanje [25]. Modeliranje može pomoći da se ova voda efikasnije iskoristi.

Modeliranje podzemnog strujanja se koristi i u eksploataciji nafte i prirodnog gasa.

1.2 Modeliranje

Modeli podzemnog strujanja vode se generalno mogu podeliti na fizičke i apstraktne. Pod fizičkim modelom se podrazumeva konstrukcija, obično manjih dimenzija, izrađena da imitira realnu podzemnu sredinu u nekom smislu. Pravljenje fizičkih modela je često skupo i nepraktično, pa se stoga koriste apstraktni modeli.

Proces apstraktnog modeliranja se sastoji od nekoliko koraka. Prvo je potrebno osmisliti konceptualni model, odnosno opisati relevantne fizičke procese koji se modeliraju. U ovom osmišljavanju moraju se zanemariti određeni fizički procesi koji značajno komplikuju model a imaju minimalan uticaj na njegovo rešenje. Primera radi u simulaciji podzemnog strujanja vode najčešće se pretpostavlja da je voda nestišljiva, što umnogome pojednostavljuje model. Ovakva pretpostavka je ispravna jer je stišljivost vode vrlo mala (voda u okeanu na dubini od 4 km pri pritisku od 400 atmosfera je kompresovana za manje od 2%).

U sledećem koraku potrebno je matematički opisati konceptualni model. Ovaj proces se naziva matematičko modeliranje i u njemu se fizički procesi opisuju matematičkim relacijama. U ovom koraku treba ispitati da li je matematički model korektno postavljen, odnosno ispitati pod kojim uslovima postoji jedinstveno i stabilno rešenje.

U modeliranju podzemnog strujanja matematički model je često predstavljen parcijalnim diferencijalnim jednačinama. Tada je rešenje postavljenog matematičkog modela moguće naći analitički samo u retkim slučajevima ili nakon velikih pojednostavljenja. Stoga se u opštem slučaju pristupa numeričkom rešavanju. Primenom neke od metoda diskretizacije dolazi se do sistema algebarskih jednačina. Ukoliko je dobijeni sistem jednačina nelinearan potrebno je izvršiti linearizaciju. Potom se rešavaju sistemi linearnih jednačina.

Pri numeričkom rešavanju treba odgovoriti na pitanje da li se primenjenom metodom dobija rešenje koje konvergira ka tačnom rešenju matematičkog modela. Takođe, potrebno je proveriti da li dobijeno numeričko rešenje krši neki od fizičkih principa koji su od značaja za postavljeni problem. Konkretno, od velike važnosti je da rešenje zadovoljava princip maksimuma i minimuma u modeliranju zagađenja kada se modeliraju i hemijske reakcije.

Sledeći korak u modeliranju predstavlja kalibracija modela, koja podrazumeva usaglašavanje rezultata dobijenih modeliranjem sa stvarno izmerenim vrednostima. Izvodi se podešavanjem parametara modela, koje je moguće izvršiti rešavanjem inverznog problema [51].

Konačno, poslednji korak predstavlja verifikacija rezultata u realnim okolnostima.

1.3 Struktura i cilj disertacije

Cilj disertacije je razvijanje numeričkog aparata za simulacije podzemnog strujanja, transporta mase i transporta energije.

Disertacija je podeljena u sedam glava, računajući i ovu u kojoj je data motivacija i predstavljena struktura.

U Glavi 2 su na osnovu osnovnih fizičkih postulata i konstitutivnih relacija izvedene parcijalne diferencijalne jednačine koje opisuju razmatrane probleme. Na osnovu Darsijevog zakona i zakona o održanju mase dobija se jednačina podzemnog strujanja u zasićenom i nezasićenom slučaju. Na sličan način izvedene su i jednačine transporta mase i transporta energije. U ovom poglavlju je takođe postavljen granični problem i razmotreno je pod kojim uslovima je on dobro postavljen.

U Glavi 3 izvedene su metode za diskretizaciju difuznog terma na primeru stacionarne jednačine podzemnog strujanja. Na isti način se izvodi diskretizacija difuznog terma i u jednačinama transporta mase i energije. Predstavljene su linearne i nelinerane metode konačnih zapremina i analizirana su njihova svojstva. Koordinatna transformacija iskorišćena je za uklanjanje diskontinuiteta u domenu. Posebna pažnja posvećena je problemima koji nastaju u slučaju prisustva bunara u modelu. Izložene su dve sheme za diskretizaciju u okolini bunara. U ovoj glavi su takođe predstavljeni načini za usrednjavanje relativne propusnosti u slučaju nezasićenog strujanja. Diskretizacija advektivnog terma izvedena je u Glavi 4. Uzvodna aproksimacija zadovoljava princip maksimuma i minimuma ali je prvog reda tačnosti. Linearnom popravkom uzvodne sheme dobija se drugi red tačnosti ali se pojavljuju oscilacije u regionima gde se gradijent brzo menja. Uvođenjem limitera dobijamo nelinearnu popravku uzvodne sheme koja zadovoljava princip makismuma i minimuma. Ovako dobijena shema je drugog reda tačnosti osim u oblastima gde se gradijent brzo menja gde je tačnost prvog reda.

Glava 5 bavi se metodama za rešavanje sistema nelinearnih jednačina. Sistem algebarskih jednačina koji se dobija diskretizacijom razmatranog sistema parcijalnih diferencijalnih jednačina može biti nelinearan iz više razloga. Prvo, u nezasićenom slučaju zasićenost i tenzor filtracije zavise od pritiska na nelinearan način. Drugo, advektivni term u jednačinama transporta je nelinearan. Treće, čak i kada su parcijalne diferencijalne jednačine od kojih se polazi linearne, nelinearne metode diskretizacije predstavljene u disertaciji daće sistem nelinearnih algebarskih jednačina.

Vremenska diskretizacija predstavljena je u Glavi 6. Najjednostavnije je vremensku diskretizaciju izvesti eksplicitnom shemom, međutim u ovakav pristup je u praksi često neprimenljiv zbog toga što zahteva veoma kratak vremenski korak. Stoga se pristupa implicitnoj diskretizaciji.

Na kraju, u Glavi 7 su dati numerički primeri koji potvrđuju razmatranja iz prethodnih glava.

Sve predstavljene metode implementirane su u projektu otvorenog koda W.O.D.A. [67] koji služi za simulaciju podzemnog strujanja uz transport mase i energije.

Glava 2

Teorijske osnove

2.1 Osnovni geološki pojmovi

U modeliranju podzemnog strujanja podzemna sredina se šematizuje pod pretpostavkom da je moguće identifikovati njenu slojevitu strukturu. Sloj predstavlja deo podzemne sredine sastavljen od manje ili više istovetnog materijala. To može biti na primer pesak, šljunak, glina, prašina, itd. Šupljine u sloju ispunjene su nekim fluidima (najčešće voda, nafta ili gas). Nije neophodno da se sloj podudara sa geološkim slojevima u podzemnoj sredini.

Sloj je porozna sredina, odnosno sastoji se od pora i čvrste materije, tj. propusnog i nepropusnog dela. Kretanje fluida u poroznoj sredini može se modelirati Navije-Stoksovim jednačinama pri čemu je domen sastavljen od pora. Ovakav pristup nazivamo mikroskopskim modelom i on je praktično neupotrebljiv u modeliranju podzemnog strujanja, jer je geometrija porozne sredine retko kada poznata. Takođe, mikroskopski pristup je neprimenljiv jer dimenzije pora mogu biti reda veličine nekoliko mikrometara, dok je dimenzija modela najčešće od nekoliko metara do više kilometara, te bi stoga rešavanje ovakvog problema daleko premašilo mogućnosti postojećih računara.

Alternativa mikroskopskom modelu je makroskopski model, gde poroznu sredinu shvatamo kao kontinuum u kome se svaki proizvoljno mali deo sastoji i od čvrste materije i od pora. U tom smislu definišemo i *poroznost* (ε) kao deo jedinične zapremine koji sadrži pore. Poroznost u podzemnoj sredini varira od 0 do 1 i može biti nula kod granitnih stena, dok kod treseta i nekih tipova zemljišta može biti čak i 0.9 [50].

Kada su pore ispunjene jednim fluidom (npr. voda) ili sa više uzajamno mešljivih fluida (npr. slana i slatka voda) onda strujanje nazivamo jednofaznim, dok u slučaju više nemešljivih fluida (npr. voda, nafta i gas) tok nazivamo višefaznim. Svi gasovi u modelu uvek predstavljaju jednu fazu, jer su svi gasovi međusobno mešljivi.

Zasićenost faze predstavlja količnik zapremine pornog prostora ispunjenog tom fazom i celokupne zapremine pornog prostora. U tom smislu za poroznu sredinu kažemo da je zasićena jednom fazom ako su sve pore ispunjene samo tom fazom.

2.2 Darsijev zakon u zasićenoj sredini

Darsijev zakon je konstitutivna relacija¹ koja opisuje tok fluida kroz poroznu sredinu na makroskopskom nivou.

Posmatrajmo kružni cilindar poprečnog preseka A i dužine l, ispunjen poroznim materijalom. Darsijev zakon kaže da je proticaj Q kroz cilindar proporcionalan razlici hidrauličkih potencijala na ulazu h_u i na izlazu h_i , kao i površini poprečnog preseka, a obrnuto proporcionalan rastojanju l (slika 2.1):

$$Q = -AK \frac{h_i - h_u}{l}.$$
(2.1)

Koeficijent proporcionalnosti K se naziva koeficijentom filtracije i predstavlja in-



Slika 2.1: Darsijev zakon.

¹Konstitutivne relacije opisuju odnos dve fizičke veličine. Konstitutivne relacije su aproksimativne, za razliku od zakona održanja.

verznu vrednost otpora na koji fluid nailazi prilikom prolaska kroz poroznu sredinu. Ovaj otpor je posledica viskoznih sila. U principu, u granularnoj sredini koeficijent filtracije raste sa veličinom čestica. Primera radi, koeficijent filtracije ima veće vrednosti za pesak i sljunak nego za glinu, jer ovi prvi pružaju manji otpor kretanju fluida.

Proticaj po jedinici površine u = Q/A naziva se Darsijeva brzina i ova brzina je manja od stvarne brzine kojom se fluid kreće kroz pore.

Relacija između hidrauličkog potencijala i pritiska je

$$h = z + \frac{p - p_{\rm a}}{\rho g},\tag{2.2}$$

gde je z visina u odnosu na proizvoljnu ali fiksiranu kotu (npr. nadmorska visina), p je pritisak u fluidu, p_a je referentni atmosferski pritisak, ρ je gustina fluida i g je intenzitet gravitacionog ubrzanja.

U graničnom slučaju kada $l \rightarrow 0$ dobijamo diferencijalni oblik Darsijevog zakona

$$u = -K \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}x},\tag{2.3}$$

odnosno u n-dimenzionalnom slučaju

$$\mathbf{u} = -\mathbb{K}\nabla h,\tag{2.4}$$

pri čemu je $\mathbb{K} = \mathbb{K}(\mathbf{x})$ tenzor dimenzije $n \times n$, vektor **u** je Darsijeva brzina, dok je ∇h gradijent hidrauličkog potencijala

$$\nabla h = \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial x_1} & \frac{\partial h}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial h}{\partial x_n} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}.$$
 (2.5)

Darsijev zakon je formulisan sredinom XIX veka na osnovu rezultata eksperimenata. Moguće ga je izvesti i iz stacionarne Navije-Stoksove jednačine za nestišljive Njutnovske fluide konstantne gustine i viskoznosti

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}, \qquad (2.6)$$

gde je μ dinamička viskoznost fluida i **g** vektor gravitacionog ubrzanja (npr. u trodimenzionalnom slučaju $\mathbf{g} = (0, 0, -g)$). Brzine podzemnog strujanja su obično

male (do nekoliko metara na dan), pa je inercioni term (term na levoj strani) moguće zanemariti jer je kvadratan. Tok se u tom slučaju svodi na Stoksovo strujanje

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} = 0. \tag{2.7}$$

U izvođenju Darsijevog zakona neophodna je pretpostavka da je viskozni otpor proporcionalan brzini [38]

$$\mu \nabla^2 \mathbf{u} = -\mu \mathbb{k}^{-1} \mathbf{u} \tag{2.8}$$

pri čemu se tenzor k naziva koeficijent propusnosti. Pregled izvođenja ove pretpostavke je moguće pronaći u [6, 8]. Zamenom (2.8) u (2.7) dobija se Darsijev zakon formulisan preko pritiska

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbb{k}}{\mu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}). \tag{2.9}$$

Ako pretpostavimo da je gustina konstantna onda iz definicije hidrauličkog potencijala (2.2) sledi

$$\nabla p - \rho \mathbf{g} = \rho g \nabla h, \qquad (2.10)$$

pa je

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbf{k}\rho g}{\mu}\nabla h. \tag{2.11}$$

Ako definišemo tenzor filtracije \mathbbm{K} kao

$$\mathbb{K} = \frac{\mathbb{k}\rho g}{\mu},\tag{2.12}$$

dolazi se do Darsijevog zakona u obliku (2.4). Primetimo da smo u izvođenju Darsijevog zakona formulisanog preko hidrauličkog potencijala morali da pretpostavimo da je gustina konstantna. Kada gustina nije konstantna neophodno je koristiti Darsijev zakon formulisan preko pritiska (2.9).

Koeficijent propusnosti k je isključivo karakteristika poroznog materijala. Određuje se laboratorijskim eksperimentima ili na osnovu empirijski izvedenih formula [50]. Koeficijent propusnosti sloja zavisi pre svega od veličine pora. Na primer glina, iako ima veliku poroznost (0.5), je više od 10000 puta slabije propusna od peska koji ima manju poroznost (0.3), jer su pore u glini mnogo manje nego u pesku.

Na osnovu jednačine (2.12) vidi se da tenzor filtracije K zavisi od karakteristika poroznog materijala ali i od karakteristika fluida, preko gustine fluida ρ i dinamičke viskoznosti μ . Pretpostavlja se da se tenzor filtracije može neprekidno menjati unutar sloja, a između dva sloja može biti prekidan. Prema tome, sloj možemo formalno definisati kao zonu u kojoj je tenzor filtracije neprekidan.

Tenzor filtracije K je simetričan na osnovu Onsagerove recipročne relacije [6]. Ovaj tenzor je pozitivno definitan, što garantuje da su svi elementi vektora $\mathbb{K}\nabla h$ pozitivni ako su pozitivni svi elementi vektora ∇h . Ako ovo ne bi važilo onda bi se fluid kretao od nižeg hidrauličkog potencijala ka višem, što je fizički nemoguće.

Poroznu sredinu nazivamo izotropnom ukoliko tenzor filtracije ne zavisi od pravca. Tada je $\mathbb{K} = K\mathbb{I}$, pri čemu je K skalarna veličina (slika 2.2 levo), a I jedinična matrica. U suprotnom poroznu sredinu nazivamo anizotropnom (slika 2.2 desno). U primeru na slici 2.2 desno porozna sredina pruža veći otpor kretanju fluida duž vertikalne ose nego duž horizontalne ose, zato što fluid u prvom slučaju mora da pređe duži put da bi prešao isto rastojanje.



Slika 2.2: Ilustracija porozne sredine na mikroskopskom nivou u izotropnom (levo) i anizotropnom (desno) slučaju

Sopstveni vektori tenzora K predstavljaju ose anizotropije, tj. pravce duž kojih je tok paralelelan gradijentu hidrauličkog potencijala. Sopstvene vrednosti predstavljaju koeficijente filtracije duž osa anizotropije.

2.3 Teorema o divergenciji

Za izvođenje jednačine podzemnog toka se koristi Teorema o divergenciji, poznata i kao teorema Gausa-Ostrogradskog.

U Dekartovim koordinatama divergencija funkcije $\mathbf{F} = (F_1, \ldots, F_n), F_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

može se predstaviti kao

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2} + \ldots + \frac{\partial F_n}{\partial x_n}.$$
(2.13)

Ukoliko \mathbf{F} predstavlja vektorsko polje brzine fluida, divergencija brzine fluida se može posmatrati kao mera širenja fluida.

Teorema 1. Neka je Ω kompaktan podskup od \mathbb{R}^n , čija je granica $\partial \Omega$ deo po deo glatka. Za neprekidno diferencijalno vektorsko polje **F** definisano u okolini skupa Ω važi

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{F} \mathrm{d}\Omega = \oint_{\partial \Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S.$$
 (2.14)

Dokaz teoreme prvi je predstavio Ostrogradski 1826. godine i danas je uobičajeno uključen u standardne udžbenike matematičke analize.

Teorema o divergenciji predstavlja specijalan slučaj Stoksove teoreme, pri čemu je u dve dimenzije nazivamo Grinova teorema, a u jednoj dimenziji fundamentalna teorema integralnog računa (Njutn-Lajbnicova formula). Više o teoremi moguće je pronaći u [41].

2.4 Održanje mase

Jedan od osnovnih fizičkih postulata je zakon održanja mase. Ovaj zakon je u ovom poglavlju formulisan za fluid u poroznoj sredini.

Posmatrajmo tok fluida kroz porozni domen $\omega \subset \mathbb{R}^3$. Neka m^{out} označava razliku mase koja je istekla i mase koja je utekla u domen kroz njegovu granicu $\partial \omega$ tokom vremena $[t_0, t_1]$. Neka je m^{gen} razlika mase koja je generisana (izvor) i mase koja je uništena (ponor) unutar domena. Prema zakonu održanja mase, ukupna masa fluida u domenu u trenutku t_1 mora biti jednaka masi fluida u trenutku t_0 umanjenoj za m^{out} i uvećanoj za m^{gen} :

$$m(t_1) = m(t_0) - m^{\text{out}} + m^{\text{gen}}.$$
 (2.15)

Masa fluida se izražava kao proizvod zapremine i gustine. Stoga je ukupna masa fluida prisutnog u domenu

$$m(t) = \int_{\omega} \theta \rho \mathrm{d}\omega, \qquad (2.16)$$

11

gde je θ količina fluida, odnosno količnik zapremine fluida u domenu i zapremine domena.

Neka je sa **n** označena spoljašnja jedinična normala na granicu $\partial \omega$. Zapremina fluida koji istekne iz domena kroz površinu malog dela granice δS tokom vremenskog intervala $[t_0, t_1]$ je

$$V = (t_1 - t_0)\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}\delta S. \tag{2.17}$$

Prema tome masa fluida koji istekne kroz δS tokom vremenskog intervala $[t_0, t_1]$ je

$$m^{\delta S} = (t_1 - t_0)\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}\delta S. \tag{2.18}$$

Prelaskom na integral dobija se ukupna razlika mase fluida koja je istekla iz domena i mase fluida koja je utekla u domen

$$m^{\text{out}} = (t_1 - t_0) \oint_{\partial \omega} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S.$$
 (2.19)

Primetimo da je m^{out} negativnog znaka ako je masa fluida koji izađe iz domena manja od mase fluida koji uđe u domen. Primenom Teoreme o divergenciji (2.14) na poslednju jednačinu dolazimo do

$$m^{\text{out}} = (t_1 - t_0) \int_{\omega} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) d\omega.$$
(2.20)

Razlika mase generisane i uništene u domenu tokom vremena $(t_1 - t_0)$ je

$$m^{\text{gen}} = (t_1 - t_0) \int_{\omega} \rho q \mathrm{d}\omega, \qquad (2.21)$$

gde je $q = q(\mathbf{x}, t)$ razlika intenziteta izvora i ponora mase u svakoj tački.

Zamenom (2.16), (2.20) i (2.21) u jednačini (2.15) i deljenjem cele jednačine sa zapreminom domena ω i sa $(t_1 - t_0)$ dobija se

$$\frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} \frac{\theta(t_1)\rho(t_1) - \theta(t_0)\rho(t_0)}{t_1 - t_0} d\omega + \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) d\omega = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} \rho q d\omega.$$
(2.22)

Prelaskom na graničnu vrednost kada $|\omega| \to 0$ i $(t_1 - t_0) \to 0$ dobija se parcijalna diferencijalna jednačina koja izražava održanje mase u poroznoj sredini

$$\frac{\partial(\theta\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \rho q. \qquad (2.23)$$

Primenom Busineskove aproksimacije² jednačina (2.23) postaje

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = q. \tag{2.24}$$

²Varijaciju gustine je moguće zanemariti svuda osim tamo gde ona množi gravitaciono ubrzianje g. Ovakva aproksimacija je validna ukoliko su varijacije gustine male.

2.5 Jednačina podzemnog strujanja u zasićenoj sredini

U zasićenoj sredini pretpostavlja se jednofazni tok. Pretpostavimo da je propusni deo porozne sredine ispunjen samo jednim fluidom, odnosno da važi $\varepsilon = \theta$. Vremenski izvod je moguće napisati na sledeći način

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial t} = S_{\rm s} \frac{\partial h}{\partial t}, \qquad (2.25)$$

gde je $S_{\rm s} = \partial \varepsilon / \partial h$ koeficijent koji se u hidrologiji naziva specifična izdašnost izdani pod pritiskom.

Zamenom Darsijevog zakona (2.4) u jednačini održanja (2.24) i na osnovu prethodne relacije se dobija evolutivna³ jednačina podzemnog strujanja

$$S_{\rm s}\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbb{K}\nabla h) = q, \qquad (2.26)$$

pri čemu je $q = q(\mathbf{x}, t)$. Stacionarna jednačina podzemnog strujanja

$$-\nabla \cdot (\mathbb{K}\nabla h) = q, \qquad (2.27)$$

sledi iz evolutivne (2.26) kada se hidraulički potencijal h ne menja sa vremenom.

Kada gustina nije konstantna ne važi jednačina (2.4), te je stoga neophodno koristiti Darsijev zakon u obliku (2.9). Evolutivna jednačina podzemnog strujanja u obliku zadatom preko pritiska glasi

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{\mathbb{k}}{\mu} (\nabla p - \rho \mathbf{g})\right) = q.$$
(2.28)

Stacionarna jednačina podzemnog strujanja u obliku zadatom preko pritiska je data kao

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\mathbb{k}}{\mu}(\nabla p - \rho \mathbf{g})\right) = q, \qquad (2.29)$$

 $^{^{3}}$ Vremenski promenljiva jednačina se u literaturi naziva i prelazna ili nestacionarna. U engleskom jeziku uobičajeni termin je *transient equation*.

2.6 Kapilarne sile

Kapilarne sile se javljaju pri dodiru čvrstih tela i tečnosti kao posledica površinskog napona. Nastaju usled dejstva sila kohezije i adhezije na molekule tečnosti. Adhezione sile deluju između tečnosti i čvrstog tela, dok kohezione sile deluju između molekula tečnosti. Kohezione sile su usmerene ka unutrašnjosti tečnosti, dok su adhezione sile usmerene ka čvrstoj sredini. Slobodna površina tečnosti se uvek postavlja normalno na rezultantu svih sila koje deluju na molekule tečnosti (adhezija, kohezija i gravitacija). Ugao φ koji površina tečnosti gradi sa čvrstim telom se naziva uglom kvašenja (slika 2.3). Kada je ovaj ugao oštar tečnost se penje uz zid čvrste sredine, a kada je tup onda dolazi do kapilarne depresije.



Slika 2.3: Kapilarne sile.

Kapilarni pritisak $p_{\rm c}$ se može izraziti formulom

$$p_{\rm c} = \frac{2\sigma\cos\varphi}{r},\tag{2.30}$$

gde je σ je površinski napon koji ne zavisi od veličine pore, φ je specifični kontaktni ugao koji slobodna površina zaklapa sa čvrstim telom, a r je poluprečnik pore. Iz ove formule se vidi da za oštar ugao φ kapilarni pritisak neograničeno raste kako se smanjuje poluprečnik pore.

Najčešći slučaj u modeliranju podzemnog strujanja vode je da su prisutne dve faze: voda i vazduh. Kapilarni pritisak $p_{\rm c}$ tada predstavlja razliku pritiska u vazduhu $p_{\rm a}$ i pritiska u vodi $p_{\rm w}$:

$$p_{\rm c} = p_{\rm a} - p_{\rm w}.\tag{2.31}$$

Kada je u modelu prisutno više od dve faze onda između svake dve faze postoji kapilarni pritisak.

2.7 Jednačina podzemnog strujanja u nezasićenoj sredini

U slučaju višefaznog toka u porama je prisutno više nemešljivih fluida. Označimo sa s_{β} zasićenost porozne sredine fluidom β , pri čemu se s_{β} definiše kao količnik zapremine tog fluida i zapremine koju zauzimaju svi fluidi zajedno (slika 2.4). Prema tome deo jedinične zapremine koji zauzima fluid β je

$$\theta_{\beta} = s_{\beta}\varepsilon, \qquad (2.32)$$

gde je ε poroznost, a θ_{β} količina fluida β u jediničnoj zapremini. U zasićenoj sredini za jedini fluid koji je prisutan važi da je s = 1, dok u nezasićenoj sredini za zasićenost svakog fluida važi da je $0 < s_{\beta} < 1$, pri čemu je



Slika 2.4: Podela jedinične zapremine na nepropusnu sredinu (gore), fluid 1 (dole levo) i fluid 2 (dole desno)

Tenzor filtracije zavisi od zasićenosti sredine i manji je u nezasićenoj sredini. Darsijev zakon se može formulisati u obliku

$$\mathbf{u} = -k_{\mathrm{r}} \mathbb{K} \nabla h, \qquad (2.34)$$

gde je K tenzor filtracije u zasićenom slučaju, a $k_{\rm r} = k_{\rm r}(\psi)$ je relativna propusnost. Pri tome je ψ veličina koja se naziva visina pritiska⁴. Ona se preko hidrauličkog potencijala definiše kao

$$\psi = h - z. \tag{2.35}$$

Kada gustina nije konstantna Darsijev zakon se može formulisati u obliku

$$\mathbf{u} = -k_{\rm r} \frac{\mathbb{k}}{\mu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}). \tag{2.36}$$

U zasićenom slučaju relativna propusnost k_r jednaka je 1, pa se jednačina (2.34) svodi na (2.4). Predstavljanje tenzora filtracije kao proizvoda skalarne funkcije k_r i konstantnog tenzora \mathbb{K} je opravdano u izotropnom slučaju, ali u anizotropnom slučaju postoje dokazi da ovakav pristup nije adekvatan [7]. Međutim, ovakav pristup je uobičajen, dok su alternativni pristupi još u povoju.

Zamenom (2.34) u jednačini održanja (2.24) za svaku fazu β se dobija jednačina

$$\frac{\partial \theta_{\beta}}{\partial t} - \nabla \cdot (k_{\beta, \mathbf{r}} \mathbb{K}_{\beta} \nabla h_{\beta}) = q_{\beta}.$$
(2.37)

Veza izmedju različitih faza se ostvaruje preko kapilarnog pritiska, tj. preko jednačine (2.31) u slučaju kada su u modelu prisutne dve faze (voda i vazduh).

Uobičajeni pristup proračunu podzemnog strujanja vode pretpostavlja da je pritisak vazduha konstantan i jednak atmosferskom pritisku. Na taj način eliminiše se jednačina koja opisuje strujanje vazduha i rešava se samo jednačina

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \cdot (k_{\rm r} \mathbb{K} \nabla h) = q. \qquad (2.38)$$

Ovu jednačinu nazivamo Ričardsova jednačina u mešovitoj formi.

Vremenski izvod je moguće napisati preko hidrauličkog potencijala na sledeći način

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial\theta}{\partial h}\frac{\partial h}{\partial t} = \mathcal{C}(h)\frac{\partial h}{\partial t},$$
(2.39)

gde je $C(h) = \partial \theta / \partial h$ specifični kapacitet vlage koji se određuje iz jednačina (2.32), (2.44) i jedne od jednačina (2.46) ili (2.48). Zamenom u (2.38) dobijamo Ričardsovu jednačinu izraženu isključivo preko hidrauličkog potencijala

$$\mathcal{C}(h)\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (k_{\rm r}\mathbb{K}\nabla h) = q. \qquad (2.40)$$

 $^{^{4}\}mathrm{U}$ engleskoj literaturi naziv je pressure head

Ova jednačina predstavlja alternativu Ričardsovoj jednačini u mešovitoj formi (2.38).

Stacionarna Ričardsova jednačina se dobija kada ne postoji promena hidrauličkog potencijala u vremenu

$$-\nabla \cdot (k_{\mathbf{r}} \mathbb{K} \nabla h) = q. \tag{2.41}$$

Jedan od nedostataka Ričardsove jednačine je što ovako nije moguće modelirati džepove gasa ili vode (slika 2.5).



Slika 2.5: Džepove vazduha (levo) i vode (sredina) nije moguće modelirati Ričardsovom jednačinom, jer se zasićenost vodom izračunava iz pritiska, odnosno uvek se modelira situacija prikazana sa desne strane.

Kada gustina nije konstantna onda se rešava Ričardsova jednačina oblika

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot \left(k_{\rm r} \frac{\mathbb{k}}{\mu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \right) + q.$$
(2.42)

U daljem tekstu se pod nezasićenim tokom podrazumeva tok vode i vazduha, pri čemu se sa s obeležava zasićenost vodom.

2.7.1 Određivanje relativne propusnosti

Visina pritiska (2.35) igra veliku ulogu u određivanju relativne propusnosti. Možemo je izraziti i preko pritiska

$$\psi = \frac{p - p_{\rm a}}{\rho g}.\tag{2.43}$$

Za određivanje relativne propusnosti potrebna je efektivna zasićenost $s_{\rm e},$ koju je moguće predstaviti preko zasićenosti formulom

$$s_{\rm e} = \frac{s - s_{\rm r}}{s_{\rm s} - s_{\rm r}},\tag{2.44}$$

pri čemu su parametri s_r i s_s respektivno rezidualna zasićenost (koja odgovara beskonačnom pornom pritisku) i maksimalna moguća zasićenost (praktično uvek 1).

Postoji više različitih načina za određivanje relativne propusnosti k_r u jednačini (2.37). Neki od najkorišćenijih su

• Model Mualema i van Genuhtena [52, 62]. Relativna propusnost se dobija formulom

$$k_{\rm r} = \sqrt{s_{\rm e}} \left[1 - \left(1 - s_{\rm e}^{1/m} \right)^m \right]^2,$$
 (2.45)

pri čemu je efektivnu zasićenost $s_{\rm e}$ moguće odrediti preko visine pritiska

$$s_{\rm e} = \begin{cases} \left(\frac{1}{1+|a\psi|^n}\right)^m & \text{ako je } \psi < 0, \\ 1 & \text{ako je } \psi \ge 0, \end{cases}$$
(2.46)

gde su *a* i *n* parametri modela, dok je m = 1 - 1/n. Parametar *a* je u vezi sa inverzom prečnika pora, dok je *n* indeks distribucije veličina pora. Na slici 2.6 prikazani su primeri grafika efektivne zasićenosti i relativne propusnosti u zavisnosti od visine pritiska ψ .

U [65] je predstavljen algoritam za efikasnu evaluaciju relativne propusnosti u Mualem–van Genuhtenovom modelu na osnovu visine pritiska.



Slika 2.6: Efektivna zasićenost s_e (levo) i relativna propusnost k_r (desno) u zavisnosti od visine pritiska, za parametre a = 1 i n = 2

• Model Bruksa i Koreja [12]. Relativna propusnost se dobija formulom

$$k_{\rm r} = s_{\rm e}^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}} \tag{2.47}$$

pri čemu se efektivna zasićenost računa kao

$$s_{\rm e} = \begin{cases} \left(\frac{\psi_{\rm b}}{\psi}\right)^{\lambda} & \text{ako je } \psi < \psi_{\rm b}, \\ 1 & \text{ako je } \psi \ge \psi_{\rm b}, \end{cases}$$
(2.48)

gde su $\psi_{\rm b}$ i λ parametri modela.

• Gardner-ov model [35]. Relativna propusnost se dobija formulom

$$k_{\rm r} = e^{-A\psi} \tag{2.49}$$

gde je A parametar modela koji zavisi od distribucije veličine pora.

2.8 Početni i granični uslovi

Da bi rešenje jednačine (2.38) bilo jedinstveno moramo zadati početne i granične uslove. Oni se zadaju na osnovu podataka utvrđenih eksperimentalno (terenskim merenjima) ili na osnovu inženjerskih pretpostavki.

Početni uslov se zadaje formulom

$$h|_{t=0} = h_0 \quad \text{na} \quad \Omega. \tag{2.50}$$

Razmatramo tri tipa graničnih uslova: Dirihleov, Nojmanov i Robinov. Nojmanovim graničnim uslovom modelira se deo granice kroz koji je poznat proticaj

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = g_{\mathrm{N}} \quad \mathrm{na} \quad \Gamma_{\mathrm{N}} \subseteq \partial \Omega,$$

$$(2.51)$$

pri čemu je **n** spoljašnja jedinična normala na Γ_N . Izmedju ostalog, Nojmanovim graničnim uslovom modeliraju se padavine ($g_N < 0$), isparavanje ($g_N > 0$), deo granice gde nema toka ($g_N = 0$), kao i bunari ako je poznata njihova izdašnost.

Dirihleovim graničnim uslovom modelira se deo granice gde je poznata vrednost hidrauličkog potencijala

$$h = g_{\rm D}$$
 na $\Gamma_{\rm D} \subseteq \partial \Omega.$ (2.52)

Dirihleovim graničnim uslovom modeliraju se bunari kada je poznat hidraulički potencijal u njima, kao i granice koje predstavljaju vodene tokove (kanali, reke, jezera, itd.). Polupropusne granice se modeliraju Robinovim graničnim uslovom

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \Psi(h - g_{\mathrm{R}}) \quad \text{na} \quad \Gamma_{\mathrm{R}} \subseteq \partial\Omega,$$
 (2.53)

pri čemu je koeficijent transfera zadat formulom $\Psi = K_k/d$, gde je K_k koeficijent filtracije kolmiranog polupropusnog sloja i d njegova debljina. Robinov granični uslov daje relaciju između normalne brzine i hidrauličkog potencijala i moguće ga je zapisati i kao linearnu kombinaciju Dirihleovog i Nojmanovog graničnog uslova

$$h - \frac{1}{\Psi} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = g_{\mathrm{R}} \quad \mathrm{na} \quad \Gamma_{\mathrm{R}} \subseteq \partial \Omega.$$
 (2.54)

Primer polupropusne granice predstavlja kolmirano rečno dno. Kolmiranje predstavlja delimično zapušavanje rečnog dna usled različitih mehaničkih, hemijskih i bioloških procesa.

U evolutivnom slučaju granični uslovi moraju biti zadati tako da važi $\Gamma_{\rm D} \cup \Gamma_{\rm R} = \overline{\Gamma_{\rm D} \cup \Gamma_{\rm R}}, \ \Gamma_{\rm D} \cup \Gamma_{\rm N} \cup \Gamma_{\rm R} = \partial \Omega$ i da su $\Gamma_{\rm D}, \ \Gamma_{\rm N}$ i $\Gamma_{\rm R}$ međusobno disjunktni skupovi. U stacionarnom slučaju potrebno je da važi još i $\Gamma_{\rm D} \cup \Gamma_{\rm R} \neq \emptyset$

2.9 Postavka graničnog problema

Stacionarno podzemno strujanje unutar otvorenog domena Ω opisano je jednačinom (2.27) u zasićenoj sredini, odnosno jednačinom (2.41) u nezasićenoj sredini. Evolutivno podzemno strujanje u oblasti $\Omega \times (0, \mathfrak{T}]$ opisano je jednačinom (2.26) u zasićenom slučaju, odnosno jednačinom (2.38) u nezasićenom slučaju. U svakoj tački na granici domena $\partial\Omega$ važi jedan od uslova (2.51), (2.52) ili (2.53). U evolutivnom slučaju za t = 0 važi početni uslov (2.50).

Matematički problem je dobro postavljen u smislu Hadamarda [55] ako:

- rešenje postoji (egzistencija),
- rešenje je jedinstveno (jedinstvenost),
- rešenje neprekidno zavisi od ulaznih podataka (stabilnost).

Uslov stabilnosti znači da dovoljno male promene u graničnim ili početnim uslovima dovode do proizvoljno malih promena u rešenju.

Stacionarna jednačina podzemnog strujanja (2.27) u zasićenoj sredini je eliptička parcijalna diferencijalna jednačina jer je \mathbb{K} pozitivno definitna matrica. Dokazi egzistencije, jedinstvenosti i stabilnosti eliptičkih graničnih problema prikazani su u [40].

Evolutivna jednačina podzemnog strujanja (2.26) u zasićenoj sredini je parabolička parcijalna diferencijalna jednačina. Dokaz egzistencije rešenja paraboličkog graničnog problema prikazan je u [40, 44], dok je dokaze jedinstvenosti i stabilnosti moguće naći u [39].

Pregled dokaza postojanja jedinstvenog stabilnog rešenja Ričardsove jednačine (2.38) moguće je pronaći u [31].

2.10 Transport mase

Pod transportom mase u podzemnoj sredini podrazumeva se prenos izvesne rastvorene materije kroz podzemnu vodu. Količina materije u vodi opisana je njenom koncentracijom C u svakoj tački domena. Koncentracija je masa posmatrane materije po jediničnoj zapremini vode. Transport mase je od značaja u modeliranju širenja zagađenja u podzemnim vodama, modeliranju intruzije slane vode u priobalne izdani itd.

Transport mase se odvija putem molekularne advekcije, difuzije i disperzije. Advekcija predstavlja prenos mase osnovnim tokom, koji se dobija iz jednačine podzemnog strujanja. Molekularna difuzija nastaje usled haotičnog kretanja pojedinačnih molekula. Do ovog kretanja rastvorene materije dolazi čak i kada je Darsijeva brzina nula. Predstavivši podzemnu sredinu kontinuumom zanemarili smo kretanje vode na sitnijim skalama uključujući i pornu skalu. Ovo kretanje izaziva dodatno mešanje vode, npr. zbog toga što voda prolazi različitim brzinama kroz pore u različitim pravcima. Ovo dodatno mešanje vode nazivamo disperzija. U podzemnom strujanju vode disperzija je obično mnogo intenzivnija od difuzije. Jednačina održanja mase (2.15) važi i za rastvorenu materiju. Pri tome je masa rastvorene materije jednaka proizvodu zapremine vode i koncentracije materije, odnosno ukupna masa rastvorene materije je

$$m(t) = \int_{\omega} \theta C \mathrm{d}\omega. \qquad (2.55)$$

Razlika mase materije koja napušta domen ω i mase materije koja ulazi u domen tokom vremenskog intervala $[t_0, t_1]$ je

$$m^{\text{out}} = (t_1 - t_0) \int_{\omega} \nabla \cdot \mathbf{v}_C d\omega, \qquad (2.56)$$

pri čemu je intenzitet brzine \mathbf{v}_C jednak proticaju materije kroz jediničnu površ normalnu na pravac toka materije. Analogno postupku opisanom u Poglavlju 2.4 dolazimo do jednačine održanja mase rastvorene materije

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_C = q_C, \qquad (2.57)$$

gde $q_C = q_C(\mathbf{x}, t)$ predstavlja izvore i ponore materije.

Brzinu \mathbf{v}_{C} možemo prikazati kao zbir advektivne brzine i brzine usled difuzije i disperzije

$$\mathbf{v}_C = \mathbf{v}_C^{\text{adv}} + \mathbf{v}_C^{\text{diff}},\tag{2.58}$$

pri čemu je advektivna brzina data formulom

$$\mathbf{v}_C^{\text{adv}} = \mathbf{u}C,\tag{2.59}$$

dok se brzina usled difuzije i disperzije aproksimira Fikovim zakonom

$$\mathbf{v}_C^{\text{diff}} = -\mathbb{D}\nabla C. \tag{2.60}$$

Pozitivno definitan simetričan tenzor \mathbb{D} predstavlja združeni efekat molekularne difuzije i disperzije i može se zapisati kao

$$\mathbb{D} = \mathbb{D}^{\text{diff}} + \mathbb{D}^{\text{dis}},\tag{2.61}$$

gde je

$$\mathbb{D}^{\text{diff}} = \theta D_{\text{d}} \mathbb{I},\tag{2.62}$$

22

pri čemu je D_d difuzivnost materije u fluidu, a I jedinična matrica. Difuzivnost materije u fluidu D_d je skalarna veličina koju je moguće pronaći u literaturi (npr. [17]) za različite vrste fluida i rastvorene materije. Uobičajeno je da se tenzor disperzivnosti računa pomoću relacije (videti [6, 8])

$$\mathbb{D}^{\text{dis}} = \alpha_{\text{T}} \|\mathbf{u}\| \mathbb{I} + (\alpha_{\text{L}} - \alpha_{\text{T}}) \mathbf{u} \mathbf{u}^{\text{T}} / \|\mathbf{u}\|$$
(2.63)

gde su $\alpha_{\rm L}$ i $\alpha_{\rm T}$ respektivno longitudalna i transferzalna disperzivnost, **u** je brzina toka, dok je $||\mathbf{u}||$ intenzitet brzine toka. U inženjerskoj praksi se obično uzima da je longitudalna disperzivnost 1/10 skale posmatranja (veličine domena), dok je transferzalna disperzivnost 1/10 longitudalne [8], mada greška uvedena na ovaj način može biti i više redova veličine [60].

Zamenom jednačina (2.62) i (2.63) u jednačini (2.61) dobijamo izraz

$$\mathbb{D} = (\theta D_{\mathrm{d}} + \alpha_{\mathrm{T}} \| \mathbf{u} \|) \mathbb{I} + (\alpha_{L} - \alpha_{\mathrm{T}}) \frac{\mathbf{u} \mathbf{u}^{\mathrm{T}}}{\| \mathbf{u} \|}, \qquad (2.64)$$

pomoću kog se računa tenzor $\mathbb D.$

Zamenom (2.58), (2.59) i (2.60) u jednačini održanja mase (2.57) dobijamo relaciju

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) - \nabla \cdot (\mathbb{D}\nabla C) = q_C, \qquad (2.65)$$

koju nazivamo advektivno difuzna jednačina⁵ ili jednačina advekcije i difuzije.

Sabirak $\nabla \cdot (\mathbf{u}C)$ se naziva advektivni term, dok se term $\nabla \cdot (\mathbb{D}\nabla C)$ najčešće naziva difuzni term iako se pomoću njega modeliraju i difuzija i disperzija. Primetimo da se pored združenog efekta difuzije i disperzije istom formom modelira i prostiranje hidrauličkog potencijala u jednačini podzemnog strujanja, iako su ovo različite fizičke pojave.

Kao i u slučaju jednačine podzemnog strujanja, potrebno je zadati početne i granične uslove da bi rešenje bilo jedinstveno određeno. Početni uslov zadaje se kao

$$C|_{t=0} = C_0 \quad \text{na} \quad \Omega. \tag{2.66}$$

Obično se koriste granični uslovi zadati na sledeći način:

⁵Ponegde u literaturi naziva se i konvektivno difuzna jednačina. Advekcija predstavlja transport mase samo tokom fluida, dok konvekcija predstavlja združeni efekat advektivnog i difuznog transporta

• Dirihleov granični uslov

$$C = g_{\rm D}^C \quad \text{na} \quad \Gamma_{\rm D}^C \subseteq \partial\Omega, \tag{2.67}$$

• Nojmanov granični uslov

$$(-\mathbb{D}\nabla C) \cdot \mathbf{n} = g_{\mathrm{N}}^C \quad \mathrm{na} \quad \Gamma_{\mathrm{N}}^C \subseteq \partial\Omega,$$
 (2.68)

• Robinov granični uslov

$$(-\mathbb{D}\nabla C) \cdot \mathbf{n} = \Psi^C (C - g_{\mathrm{R}}^C) \quad \text{na} \quad \Gamma_{\mathrm{R}}^C \subseteq \partial\Omega,$$
 (2.69)

gde je **n** spoljašnja jedinična normala na granicu domena, a Ψ^C koeficijent transfera za koncentraciju po analogiji sa Robinovim uslovom (2.53) za jednačinu podzemnog strujanja.

Granični uslovi u evolutivnom slučaju moraju biti zadati tako da važi $\Gamma_D^C \cup \Gamma_R^C = \overline{\Gamma_D^C \cup \Gamma_R^C}$, $\Gamma_D^C \cup \Gamma_N^C \cup \Gamma_R^C = \partial \Omega$ i da su Γ_D^C , Γ_N^C i Γ_R^C uzajamno disjunktni skupovi. U stacionarnom slučaju neophodno je da važi i $\Gamma_D^C \cup \Gamma_R^C \neq \emptyset$.

Prisustvo rastvorene materije može promeniti gustinu vode, tada je neophodno Darsijevu brzinu predstaviti preko pritiska. Promena u gustini utiče na jednačinu strujanja preko terma $\rho \mathbf{g}$. Stoga su jednačine podzemnog strujanja i transporta mase spregnute preko gustine i fluksa, što znači da ih je potrebno rešavati istovremeno. Uticaj koncentracije na viskoznost se obično zanemaruje.

Kada prisustvo rastvorene materije tek neznatno menja gustinu vode moguće je zanemariti promene u gustini vode. U ovom slučaju koncentracija ne utiče na strujnu sliku te govorimo o pasivnom transportu⁶. Jednačina podzemnog strujanja više ne zavisi od transporta mase, ali transport zavisi od strujne slike. Ponekad u primenama strujna slika može biti unapred poznata i tada se rešava samo jednačina transporta mase.

2.10.1 Sorpcija i degradacija

U slučaju kada se modeliraju sorpcija, degradacija ili hemijske reakcije, u jednačini transporta (2.65) postoje dodatni termi.

 $^{^6\}mathrm{Rastvorena}$ materija se u tom slučaju naziva traser.

Sorpcija predstavlja zadržavanje rastvorene materije iz vode u čvrstoj fazi i njeno postepeno oslobađanje nazad u vodu. Sorpcijom rastvorene materije u poroznoj sredini usporava se brzina njenog napradovanja u odnosu na tok.

Koncentracija materije u čvrstoj fazi ${\cal C}$ opisuje se jednačinom

$$\frac{\partial C}{\partial t} = a(C - b\bar{C}), \qquad (2.70)$$

pri čemu parametar a definiše brzinu razmene materije između vode i čvrste faze, a parametar b opisuje odnos koncentracije u čvrstoj i tečnoj fazi u ravnotežnom stanju. Da bi ova jednačina imala jedinstveno rešenje potrebno je zadati početni uslov za koncentraciju u čvrstoj fazi.

Kada postoji sorpcija, jednačina koja opisuje koncentraciju u vodi glasi

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) - \nabla \cdot (\mathbb{D}\nabla C) + (1-\varepsilon)a(C-b\bar{C}) = q_C.$$
(2.71)

pri čemu poslednji term na levoj strani predstavlja materiju koja je prešla iz tečne u čvrstu fazu. Jednačine (2.70) i (2.71) su spregnute i potrebno ih je rešavati istovremeno.

Usled hemijskih ili nuklearnih reakcija, kao i prisustva bakterija, može doći do raspadanja molekula rastvorene materije. Ovaj proces se naziva degradacijom ili razgradnjom i u odsustvu transporta može se modelirati jednačinom

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\ln 2}{t_{1/2}}C,\tag{2.72}$$

pri čemu je $t_{1/2}$ period poluraspada materije u vodi.

Ukoliko u modelu postoji i sorpcija i degradacija, transportna jednačina koja opisuje koncentraciju u vodi glasi

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) - \nabla \cdot (\mathbb{D}\nabla C) + (1-\varepsilon)a(C-b\bar{C}) + \frac{\ln 2}{t_{1/2}}\theta C = q_C.$$
(2.73)

Degradacija može postojati i u čvrstoj fazi. Tada je koncentracija u čvrstoj fazi umesto jednačinom (2.70) opisana formulom

$$\frac{\partial C}{\partial t} = a(C - b\bar{C}) - \frac{\ln 2}{\bar{t}_{1/2}}\bar{C}, \qquad (2.74)$$

gde je $\bar{t}_{1/2}$ period poluraspada materije u čvrstoj fazi. Ukoliko se radi o nuklearnom raspadanju, periodi poluraspada $t_{1/2}$ i $\bar{t}_{1/2}$ su isti, u suprotnom to ne mora biti slučaj.
Degradacija u čvrstoj fazi utiče preko jednačine (2.74) na koncentraciju materije u vodi.

Često se pretpostavlja da je kretanje vode veoma sporo u odnosu na brzinu reakcije a, tako da su u svakom trenutku koncentracija u vodi i u čvrstoj fazi u ravnoteži. Ovo je ekvivalentno pretpostavci da je brzina razmene a beskonačna. Deljenjem jednačine (2.74) sa a dobijamo da mora biti $C = b\bar{C}$. Množenjem jednačine (2.74) sa $(1 - \varepsilon)$ i dodavanjem jednačini (2.73) uz eliminaciju \bar{C} dobija se jednačina

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{1-\varepsilon}{b}\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) - \nabla \cdot (\mathbb{D}C) + \frac{\ln 2}{t_{1/2}}\theta C + \frac{1-\varepsilon}{b}\frac{\ln 2}{\bar{t}_{1/2}}C = q_C, \quad (2.75)$$

koja izražava održanje mase istovremeno i u vodi i u čvrstoj fazi.

2.11 Transport toplotne energije

Toplotna energija se prenosi i kroz fluid i kroz čvrstu fazu. Mehanizmi transporta energije u fluidu su: advekcija, disperzija i kondukcija⁷. Transport kroz čvrstu fazu se odvija isključivo putem kondukcije. Pretpostavlja se da je u svakoj tački temperatura čvrste materije jednaka temperaturi fluida jer je tok spor.

Toplotna energija po jedinici zapremine se može izraziti kao

$$E = \rho c T, \tag{2.76}$$

gde je c specifična toplota, a T temperatura. Slično kao i u slučaju transporta mase (Poglavlje 2.10), održanje toplotne energije u vodi se može izraziti formulom

$$\frac{\partial(\theta\rho c_{\mathbf{w}}T)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_{T_{\mathbf{w}}} = q_{T_{\mathbf{w}}}, \qquad (2.77)$$

gde je $c_{\rm w}$ specifična toplota vode, $\mathbf{v}_{T_{\rm w}}$ predstavlja brzinu prenošenja toplotne energije kroz vodu, a $q_{T_{\rm w}} = q_{T_{\rm w}}(\mathbf{x}, t)$ predstavlja izvore i ponore toplotne energije u vodi.

Brzina prenošenja toplotne energije kroz vodu može se predstaviti kao zbir advektivne brzine i brzine usled kondukcije i disperzije

$$\mathbf{v}_{T_{w}} = \mathbf{v}_{T_{w}}^{\text{adv}} + \mathbf{v}_{T_{w}}^{\text{diff}}, \qquad (2.78)$$

⁷Kondukcija je u transportu toplotne energije matematički analogna difuziji u transportu mase.

pri čemu je advektivna brzina

$$\mathbf{v}_{T_{\mathbf{w}}}^{\mathrm{adv}} = \mathbf{u} E_{\mathbf{w}},\tag{2.79}$$

dok je brzina usled kondukcije i disperzije aproksimirana Furijeovim zakonom

$$\mathbf{v}_{T_{\mathbf{w}}}^{\text{diff}} = -\lambda_{\mathbf{w}} \nabla T. \tag{2.80}$$

Tenzor $\lambda_{\rm w}$ opisuje združeni efekat kondukcije i termalne disperzije. Ovaj tenzor se računa slično kao i tenzor difuzije i disperzije mase (2.64)

$$\lambda_{\rm w} = (\theta \lambda_{\rm w}^{\rm cond} + \rho c_{\rm w} \gamma_{\rm T} \|\mathbf{u}\|) \mathbb{I} + \rho c_{\rm w} (\gamma_{\rm L} - \gamma_{\rm T}) \frac{\mathbf{u} \mathbf{u}^{\rm T}}{\|\mathbf{u}\|}, \qquad (2.81)$$

gde je $\lambda_{\rm w}^{\rm cond}$ termalna provodljivost vode, a $\gamma_{\rm L}$ i $\gamma_{\rm T}$ su respektivno longitudalna i transferzalna termalna disperzivnost. Termalna provodljivost je skalar koji se može pronaći tabeliran u literaturi, a longitudalna i transferzalna termalna disperzivnost se ocenjuju slično kao u slučaju transporta mase.

U poroznoj sredini čvrsta materija zauzima $(1 - \varepsilon)$ od jedinične zapremine (slika 2.4). Stoga, jednačina održanja toplotne energije u čvrstom materijalu glasi

$$\frac{\partial((1-\varepsilon)\rho_{\rm s}c_{\rm s}T)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_{T_{\rm s}} = q_{T_{\rm s}},\tag{2.82}$$

pri čemu je $\rho_{\rm s}$ gustina čvrstog materijala, $c_{\rm s}$ je specifična toplota čvrstog materijala, $\mathbf{v}_{T_{\rm s}}$ je proticaj toplotne energije po jedinici površine kroz čvrsti materijal, a $q_{T_{\rm s}}$ predstavlja izvore i ponore toplotne energije u čvrstom materijalu.

U čvrstom materijalu nema advekcije i disperzije, pa proticaj \mathbf{v}_{T_s} zavisi samo od termalne provodljivosti čvrstog materijala λ_s^{cond} i računa se iz Furijeovog zakona

$$\mathbf{v}_{T_{\rm s}} = -(1-\varepsilon)\lambda_{\rm s}^{\rm cond}\nabla T. \tag{2.83}$$

Termalna provodljivost λ_s^{cond} je u opštem slučaju anizotropni tenzor. Neki materijali (recimo safir) sa kristalnom strukturom zaista imaju anizotropan tenzor termalne provodljivosti.

Sabiranjem jednačina održanja energije u fluidu (2.77) i u čvrstom telu (2.82) i zamenom relacija za proticaje (2.78) i (2.83) dobija se jednačina održanja toplotne energije u poroznoj sredini

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[(\theta \rho c_{\rm w} + (1 - \varepsilon) \rho_{\rm s} c_{\rm s}) T \right] + \nabla \cdot (\mathbf{u} \rho c_{\rm w} T) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = q_T, \qquad (2.84)$$

gde je

$$\lambda = \lambda_{\rm w} + (1 - \varepsilon) \lambda_{\rm s}^{\rm cond}, \qquad (2.85)$$

$$q_T = q_{T_w} + q_{T_s}.$$
 (2.86)

Takođe, i u slučaju transporta energije neophodno je zadati početne i granične uslove da bi rešenje bilo jedinstveno određeno. Početni uslov se zadaje formulom

$$T|_{t=0} = T_0 \quad \text{na} \quad \Omega. \tag{2.87}$$

Najčešće se koriste sledeći granični uslovi:

• Dirihleov granični uslov

$$T = g_{\rm D}^T$$
 na $\Gamma_{\rm D}^T \subseteq \partial\Omega,$ (2.88)

• Nojmanov granični uslov

$$(-\lambda \nabla T) \cdot \mathbf{n} = g_{\mathrm{N}}^T \quad \mathrm{na} \quad \Gamma_{\mathrm{N}}^T \subseteq \partial \Omega,$$
 (2.89)

• Robinov granični uslov

$$(-\lambda \nabla T) \cdot \mathbf{n} = \Psi^T (T - g_{\mathrm{R}}^T) \quad \text{na} \quad \Gamma_{\mathrm{R}}^T \subseteq \partial \Omega,$$
 (2.90)

gde je **n** spoljašnja jedinična normala na granicu domena. Granični uslovi i u evolutivnom slučaju transporta energije moraju biti zadati tako da važi $\Gamma_{\rm D}^T \cup \Gamma_{\rm R}^T = \overline{\Gamma_{\rm D}^T \cup \Gamma_{\rm R}^T}, \Gamma_{\rm D}^T \cup \Gamma_{\rm N}^T \cup \Gamma_{\rm R}^T = \partial \Omega$ i da su $\Gamma_{\rm D}^T, \Gamma_{\rm N}^T$ i $\Gamma_{\rm R}^T$ međusobno disjunktni skupovi. U stacionarnom slučaju mora biti ispunjen i uslov $\Gamma_{\rm D}^T \cup \Gamma_{\rm R}^T \neq \emptyset$.

Promena temperature dovodi do promene viskoznosti i gustine vode, pa prema tome preko terma k/μ i terma $\rho \mathbf{g}$ utiče na jednačinu podzemnog strujanja. Zbog toga je potrebno istovremeno rešavati jednačinu podzemnog strujanja i transporta energije, pri čemu je relacije zavisnosti koeficijenta viskoznosti od temperature moguće pronaći u literaturi.

Kada se modelira i transport mase, gustina zavisi i od koncentracije i od temperature. Tada je potrebno istovremeno rešavati jednačinu podzemnog strujanja, jednačinu transporta mase i jednačinu transporta energije.

2.12 Princip maksimuma i minimuma

Neka je u unutrašnjosti domena Ω problem zadat eliptičkom parcijalnom diferencijalnom jednačinom (npr. stacionarno podzemno strujanje (2.27)) i neka u svakoj tački granice domena $\partial\Omega$ važi Dirihleov (2.52), Robinov (2.53) ili Nojmanov (2.51) granični uslov.

Globalni princip maksimuma je svojstvo da rešenje ovog graničnog problema h dostiže maksimum na $\partial\Omega$ ako je $q \leq 0$ svuda u Ω . Ako pritom važi i $g_N \geq 0$ (granica odliva) onda h dostiže maksimum na $\Gamma_D \cup \Gamma_R$. U ovom slučaju rešenje ne može da dostigne maksimum na Γ_N , jer je tok usmeren od višeg hidrauličkog potencijala ka nižem pa bi to bila granica priliva. To znači da je gornje ograničenje rešenja unapred poznato i određeno Dirihleovim i Robinovim uslovom. Ukoliko je $q \leq 0$ svuda i $g_N < 0$ negde na Γ_N onda gornje ograničenje nije poznato unapred, iako se zna da se maksimum i dalje dostiže na granici $\partial\Omega$.

Globalni princip minimuma je svojstvo da h dostiže minimum na $\partial\Omega$ ako je $q \ge 0$ svuda u Ω . Ako je pritom i $g_N \le 0$ (granica priliva) onda se minimum hidrauličkog potencijala dostiže na $\Gamma_D \cup \Gamma_R$. U ovom slučaju minimum ne može biti na Γ_N , jer bi tada to bila granica odliva. Kada je $q \ge 0$ svuda i $g_N > 0$ negde na Γ_N onda se minimum i dalje dostiže na granici, ali donje ograničenje nije poznato unapred.

Na isti način se formuliše globalni princip maksimuma (minimuma) za paraboličku parcijalnu diferencijalnu njednačinu ako početno rešenje nema maksimum (minimum) u unutrašnjosti domena.

Primetimo da globalni princip maksimuma (minimuma) dozvoljava da se lokalni maksimum (minimum) dostiže i unutar domena, ako je maksimum dostignut na granici (Slika 2.7).

Ukoliko za svaki podskup domena Ω rešenje zadovoljava globalni princip maksimuma (minimuma), kažemo da je zadovoljen lokalni princip maksimuma (minimuma).

U analogiji sa principom maksimuma (minimuma) koji je formulisan za rešenje graničnog problema, uvodi se pojam diskretnog principa maksimuma (minimuma)



Slika 2.7: Primer g
de je zadovoljen globalni princip maksimuma i minimuma na
 [a, b], ali ne i lokalni.

za numeričko rešenje, odnosno za rešenje diferencijske sheme.

Iako analitičko rešenje zadovoljava lokalni princip maksimuma i minimuma, većina numeričkih shema može da da rešenje koje ne zadovoljava čak ni globalni diskretni princip maksimuma i minimuma. Stoga se pristupa konstrukciji numeričkih shema koje će zadovoljavati globalni ili lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma.

Glava 3

Diskretizacija stacionarne jednačine podzemnog strujanja

Analitičko rešenje parcijalnih diferencijalnih jednačina je moguće naći samo u određenim slučajevima. Stoga se pristupa aproksimativnom rešavanju korišćenjem numeričkih metoda. Prvi korak u numeričkom rešavanju predstavlja diskretizacija.

Neka je domen Ω otvoren i povezan skup i neka je \mathcal{M} mreža koja se sastoji od poliedarskih, odnosno poligonalnih ćelija (kontrolnih zapremina) \mathcal{T} takvih da važi

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{M}} \overline{\mathcal{T}},\tag{3.1}$$

pri čemu su ćelije \mathcal{T} disjunktni otvoreni skupovi. Pretpostavljamo da je svaka ćelija $\mathcal{T} \in \mathcal{M}$ zvezdolik skup¹ u odnosu na svoje težište. Temena ćelija nazivaju se čvorovima mreže. Mrežu je potrebno konstruisati tako da se mogući diskuntinuiteti u tenzoru konstitutivne relacije poklapaju sa stranama mreže.

Za svaku ćeliju \mathcal{T} definišemo tačku kolokacije $\mathbf{x}_{\mathcal{T}}$ u njenom težištu i pridružujemo joj diskretnu vrednost fižičke veličine. Pomoćne tačke kolokacije definisaćemo u zavisnosti od metode.

Mrežu nazivamo strukturnom ako svi unutrašnji čvorovi pripadaju istom broju ivica i ako svaka ćelija ima isti broj strana (slika 3.1), u suprotnom mrežu nazivamo nestrukturnom. Specijalna vrsta strukturnih mreža su pravougaone mreže (slika 3.1

¹Skup $S \subseteq \mathbb{R}^n$ je zvezdolik u odnosu na tačku $x_0 \in S$, ako za svaku tačku $x \in S$ važi da duž $[x_0, x]$ pripada skupu S.

desno).

Izbor mreže zavisi od konkretnog problema koji se rešava. Prednost strukturnih mreža je ušteda računarske memorije, obizrom da kod strukturnih mreža nije potrebno skladištiti informaciju o povezanosti ćelija. Pored toga u slučaju pravougaonih mreža prednost je jednostavnija diskretizacija. Međutim, granicu domena najčešće nije moguće tačno predstaviti pravougaonim mrežama.



Slika 3.1: Strukturne mreže u dve dimenzije.

Ukoliko je geometrija modela komplikovana, generisanje strukturne mreže može da bude mukotrpan posao koji nije moguće sasvim automatizovati. Sa druge strane, postoje algoritmi koji automatski generišu kvalitetne nestrukturne mreže i u najkomplikovanijim slučajevima. Stoga, nestrukturne mreže predstavljaju najčešći izbor u primenama sa kompleksnom geometrijom. U ovom radu akcenat je stavljen na nestrukturne mreže, s obzirom da je potrebno modelirati bunare sa više drenova (Reni bunari²) koji kao i sama podzemna sredina mogu imati kompleksnu geometriju.

Metode konačnih razlika je moguće primeniti samo na one jednačine kod kojih je term koji opisuje fluks predstavljen pomoću divergencije. Za ovakve jednačine kažemo da su zadate u konzervativnom obliku.

Razmotrimo za početak stacionarnu varijantu jednačine održanja (2.24). Integracijom po svakoj ćeliji $\mathcal{T} \in \mathcal{M}$ dobijamo

$$\int_{\mathcal{T}} \nabla \cdot \mathbf{u} \mathrm{d}\Omega = \int_{\mathcal{T}} q \mathrm{d}\Omega, \qquad (3.2)$$

 $^{^2 \}mathrm{Na}$ engleskom jeziku $Ranney \ wells,$ ime su dobili po inženjeru Leu Reniju

što primenom Teoreme o divrgenciji (2.14) postaje

$$\int_{\partial \mathcal{T}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S = \int_{\mathcal{T}} q \mathrm{d}\Omega.$$
(3.3)

Pošto je svaka ćelija \mathcal{T} poliedar (poligon u dvodimenzionalnom slučaju) njena granica $\partial \mathcal{T}$ se sastoji od konačnog broja strana f, pa prethodnu jednačinu možemo zapisati

$$\sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} u_f^{\mathcal{T}} = \int_{\mathcal{T}} q \mathrm{d}\Omega, \qquad (3.4)$$

pri čemu je fluks kroz stranu f

$$u_f^{\mathcal{T}} = \int_f \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_f^{\mathcal{T}} \mathrm{d}S,\tag{3.5}$$

gde je $\mathbf{n}_f^{\mathcal{T}}$ jedinični vektor normalan na stranu f usmeren van ćelije \mathcal{T} .

Na osnovu prethodne jednačine za fluks kroz stranu $f = \partial \mathcal{T}^+ \cap \partial \mathcal{T}^-$ važi

$$u_f^+ = -u_f^-. (3.6)$$

Ova osobina se naziva *lokalno odražanje*. Razlika u znaku se pojavljuje jer je $\mathbf{n}_f^+ = -\mathbf{n}_f^-$. Da bismo izbegli komplikovanu notaciju uvodimo jedinstvenu normalu \mathbf{n}_f koja je usmerena od ćelije sa manjim indeksom (npr. \mathcal{T}^+) ka ćeliji sa većim indeksom (npr. \mathcal{T}^-)

$$u_f = u_f^+ = -u_f^-. (3.7)$$

Različite varijante metode konačnih zapremina se razlikuju u načinu na koji se aproksimiraju fluksevi u_f .

Mi ćemo ovde podeliti metode konačnih zapremina za diskretizaciju fluksa na one koje koriste diskretne vrednosti u dve ćelije kojima pripada strana f (TPFA³) i na one koje koriste diskretne vrednosti u više od dve ćelije (MPFA⁴). Diskretizacija fluksa TPFA shemama je predstavljena u Poglavlju 3.1, dok je MPFA shema predstavljena u Poglavlju 3.2. Opširan pregled metoda konačnih zapremina je dat u [28].

Uklanjanje diskontinuiteta u tenzoru konstitutivne relacije predstavljeno u Poglavlju 3.3 moguće je primeniti i na TPFA sheme i na MPFA sheme. Takođe,

 $^{^3\}mathrm{TPFA}$ - skr. od termina na engleskom jeziku two-point flux approximation

 $^{^4\}mathrm{MPFA}$ - skr. od termina na engleskom jeziku multipoint flux approximation

diskretizaciju bunara prestavljenu u Poglavlju 3.4 moguće je primeniti i na TPFA i na MPFA sheme.

Zbog jednostavnije notacije i lakšeg razumevanja u poglavljima 3.1-3.4 je pretpostavljeno da je gustina konstantna. To znači da je brzina dobijena iz Darsijevog zakona preko hidrauličkog potencijala, pa je Darsijev fluks kroz stranu f

$$u_f^{\mathcal{T}} = -\int_f (\mathbb{K}\nabla h) \cdot \mathbf{n}_f^{\mathcal{T}} \mathrm{d}S = -\int_f (\mathbb{K}\mathbf{n}_f^{\mathcal{T}}) \cdot \nabla h \mathrm{d}S.$$
(3.8)

Kada gustina nije konstantna Darsijev fluks se računa pomoću sledeće formule

$$u_f^{\mathcal{T}} = -\int_f \frac{\mathbb{k}}{\mu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n}_f \mathrm{d}S.$$
(3.9)

Razlike koje se pojavlju u poglavljima 3.1–3.4 kada gustina nije konstantna objašnjene su u Poglavlju 3.5.

Diskretizacija Darsijevog fluksa u nezasićenoj sredini je opisana u poglavlju 3.6.

3.1 TPFA sheme

U ovom poglavlju predstavljena je aproksimacija fluksa korišćenjem diskretnih vrednosti u dve ćelije. Linearna aproksimacija fluksa na stranama na kojima nema diskontinuiteta predstavljena je u Odeljku 3.1.1, dok je nelinearna aproksimacija fluksa predstavljena u Odeljku 3.1.2. Aproksimacija fluksa TPFA shemama uvođenjem pomoćnih tačaka kolokacije na stranama gde postoji materijalni diskontinuitet predstavljena je u Odeljku 3.1.3.

3.1.1 Linearna TPFA shema

Najjednostavnija aproksimacija fluksa se dobija tako što se izvod u pravcu aproksimira konačnom razlikom. U slučaju jednačine podzemnog strujanja, fluks (3.8) kroz stranu $f = \partial \mathcal{T}^+ \cap \partial \mathcal{T}^-$ možemo aproksimirati formulom

$$u_f = -\int_f (\mathbb{K}\mathbf{n}_f) \cdot \nabla h \mathrm{d}S \approx -|f| \|\mathbb{K}_f \mathbf{n}_f\| \frac{h_- - h_+}{\|\mathbf{x}_- - \mathbf{x}_+\|},\tag{3.10}$$

pri čemu je $\mathbb{K}_f = \mathbb{K}(\mathbf{x}_f)$ gde je \mathbf{x}_f težište strane f, \mathbf{n}_f jedinični vektor normalan na stranu f usmeren od \mathcal{T}^+ ka \mathcal{T}^- , dok |f| predstavlja površinu strane f u trodimenzionalnom slučaju, odnosno dužinu strane f u dvodimenzionalnom slučaju. Diskretne vrednosti hidrauličkog potencijala u ćelijama \mathcal{T}^+ i \mathcal{T}^- obeležene su sa h_+ i h_- , dok su tačke kolokacije u tim ćelijama označene sa \mathbf{x}_+ i \mathbf{x}_- . Sa $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ obeležavamo standardnu Euklidsku normu.

Na ovaj način dobijena je aproksimacija fluksa uz pomoć dve tačke u obliku

$$u_f \approx M_f^+ h_+ - M_f^- h_-,$$
 (3.11)

pri čemu je

$$M_f^{\pm} = \frac{\|f\| \|\mathbb{K}_f \mathbf{n}_f\|}{\|\mathbf{x}_{-} - \mathbf{x}_{+}\|}.$$
 (3.12)

Kada je na strani $f \in \Gamma_N$ zadat **Nojmanov** granični uslov $f \in \Gamma_N$, fluks aproksimiramo formulom:

$$u_f = \int_f g_{\rm N} \mathrm{d}S \approx |f| g_{\rm N}(\mathbf{x}_f), \qquad (3.13)$$

gde je \mathbf{x}_f težište strane f.

Granične strane na kojima je zadat Dirihleov ili Robinov granični uslov možemo posmatrati kao ćelije sa zapreminom nula. Definišimo pomoćnu tačku kolokacije \mathbf{x}_f u težištu strane f. Ukoliko u izvođenju koje je dovelo do jednačine (3.11) umesto \mathcal{T}^+ i \mathcal{T}^- imamo \mathcal{T} i f, dolazimo do aproksimacije preko dve tačke

$$u_f \approx M_f^{\mathcal{T}} h_{\mathcal{T}} - M_f^f h_f, \qquad (3.14)$$

pri čemu je h_f diskretna vrednost hidrauličkog potencijala u pomoćnoj tački kolokacije $\mathbf{x}_f.$

Kada je na strani f zadat **Dirihleov** granični uslov diskretna vrednost hidrauličkog potencijala $h_f = g_D(\mathbf{x}_f)$ je poznata iz graničnog uslova (2.52). Stoga fluks u jednačini (3.5) možemo predstaviti kao:

$$u_f \approx M_f^{\mathcal{T}} h_{\mathcal{T}} - M_f^f g_{\mathrm{D}}(\mathbf{x}_f).$$
(3.15)

Kada je na strani f zadat **Robinov** granični uslov, na osnovu (2.53) fluks je moguće aproksimirati kao:

$$u_f \approx |f|\Psi(h_f - g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_f)). \tag{3.16}$$

Eliminacijom h_f iz jednačina (3.14) i (3.16) dobijamo aproksimaciju fluksa

$$u_f \approx \frac{|f|\Psi M_f^{\mathcal{T}}}{|f|\Psi + M_f^f} h_{\mathcal{T}} - \frac{|f|\Psi M_f^f}{|f|\Psi + M_f^f} g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_f).$$
(3.17)

Obeležimo sa $D_{+,f}$ pravu koja prolazi kroz tačku \mathbf{x}_+ u pravcu $\mathbb{K}_f \mathbf{n}_f$. Za mrežu kažemo da zadovoljava uslov ortogonalnosti u odnosu na tenzor \mathbb{K} ukoliko:

• Za svaku stranu fizmeđu dve ćelije \mathcal{T}^+ i \mathcal{T}^- važi

$$D_{+,f} \cap f = D_{-,f} \cap f \neq \emptyset, \tag{3.18}$$

• Za svaku stranu f koja pripada granici samo jedne ćelije \mathcal{T} (takva strana se nalazi na granici domena Ω) važi

$$D_{\mathcal{T},f} \cap f \neq \emptyset. \tag{3.19}$$



Slika 3.2: Primer mreže gde nije ispunjen princip ortogonalnosti za izotropni tenzor $\mathbb{K}.$

Napomena. Za linearnu TPFA shemu pomoćne tačke kolokacije, kada god je to moguće, treba da budu definisane tako da je zadovoljen uslov ortogonalnosti u odnosu na tenzor konstitutivne relacije. Na primer u izotropnom slučaju za pomoćne tačke kolokacije \mathbf{x}_f treba uzeti ortogonalnu projekciju težišta $\mathbf{x}_{\mathcal{T}}$ na stranu f.

U slučaju strukturne pravougaone mreže sa izotropnim tenzorom, diskretizacija dobijena linearnom TPFA shemom je identična diskretizaciji dobijenoj metodom konačnih razlika sa tačkama kolokacije u centrima ćelija. Kada mreža zadovoljava uslov ortogonalnosti u odnosu na tenzor konstitutivne relacije, shema dobijena aproksimacijom fluksa (3.10) je prvog reda tačnosti za fluks i drugog reda tačnosti za hidraulički potencijal [30], što je i pokazano u Primeru 1.

Zamenom aproksimiranih vrednosti fluksa (3.11), (3.13), (3.15) i (3.17) u jednačini (3.4) i evaluacijom ponora dobijamo za svaku ćeliju $\mathcal{T} \in \mathcal{M}$

$$\sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} M_f^{\mathcal{T}} h_{\mathcal{T}} - \sum_{\substack{f \subset \partial \mathcal{T} \\ f = \partial \mathcal{T} \cap \partial L, L \in \mathcal{M}}} M_f^L h_L = |\mathcal{T}| q_{\mathcal{T}} + \sum_{f = \partial \mathcal{T} \cap \partial \Omega} \mathfrak{F}_f, \quad (3.20)$$

pri čemu je

$$q_{\mathcal{T}} = q(\mathbf{x}_{\mathcal{T}}),\tag{3.21}$$

$$\mathfrak{F}_{f} = \begin{cases} -|f|g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{f}), & \text{ako je } f \subseteq \Gamma_{\mathrm{N}}, \\\\ M_{f}^{f}g_{\mathrm{D}}(\mathbf{x}_{f}), & \text{ako je } f \subseteq \Gamma_{\mathrm{D}}, \\\\ \frac{|f|\Psi M_{f}^{f}}{|f|\Psi + M_{f}^{f}}g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_{f}) & \text{ako je } f \subseteq \Gamma_{\mathrm{R}}. \end{cases}$$
(3.22)

Na ovaj način dobija se sistem linearnih jednačina

$$A\mathbf{h} = \mathbf{b},\tag{3.23}$$

gde je A matrica sistema dimenzije $\operatorname{card}(\mathcal{M}) \times \operatorname{card}(\mathcal{M})$ i **h** vektor nepoznatih diskretnih vrednosti hidrauličkog potencijala u ćelijama.

Definicija 1. Matrica je nesvodljiva ako se ne može permutacijama redova i vrsta svesti na gornje-trougaonu matricu.

Definicija 2. Nesvodljivu matricu A nazivamo **M-matricom** ukoliko za njene elemente a_{ij} važi:

- svi elementi na glavnoj dijagonali su pozitivni, tj. $a_{ii} > 0$ za svako i,
- svi elementi van glavne dijagonale su nepozitivni, tj. $a_{ij} \leq 0$ za svako $i \neq j$,
- suma svake kolone matrice je nenegativna i postoji bar jedna kolona čija je suma pozitivna.

Definicija 3. Matrica A se naziva dijagonalno dominantnom ako za njene elemente a_{ij} važi

$$|a_{ii}| \ge \sum_{j \ne i} |a_{ij}|, \quad za \ svako \ i. \tag{3.24}$$

Matrica je nesvodljiva ako je njen graf jako povezan (videti [32]). Za povezanu mrežu \mathcal{M} graf matrice A je jako povezan [18], pa je matrica A nesvodljiva.

Na osnovu (3.12), (3.15) i (3.17) koeficijenti M_f^{\pm} i $M_f^{\mathcal{T}}$ su uvek nenegativni, pa se u matrici sistema (3.20) na glavnoj dijagonali nalaze pozitivni elementi a van nje negativni. Primetimo da je doprinos fluksa kroz stranu $f = \partial \mathcal{T}^+ \cap \partial \mathcal{T}^-$ elementima matrice a_{\pm} jednak $\pm M_f^+$, dok je doprinos elementima matrice a_{\pm} jednak $\pm M_f^-$. Sa druge strane fluks kroz stranu $f = \partial \mathcal{T} \cap \partial \Omega$ doprinosi samo elementu $a_{\mathcal{T}\mathcal{T}}$ i taj doprinos je jednak $M_f^{\mathcal{T}}$. Stoga je suma kolone pozitivna ukoliko ta kolona odgovara ćeliji koja ima graničnu stranu, a u suprotnom je jednaka nuli. Prema tome matrica sistema dobijena TPFA shemom (3.11) je M-matrica. Na osnovu dobro poznate teoreme da svaka M-matrica ima inverz [9] postoji jedinstveno rešenje sistema (3.23).

Linearna TPFA shema zadovoljava lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma na osnovu sledeće teoreme koja je formulisana i dokazana u [15].

Teorema 2. Shema diskretizacije zadovoljava lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma ako je matrica sistema dijagonalno dominantna M-matrica.

Problem sa linearnom TPFA shemom je što profinjavanje mreže [2] ne dovodi do smanjenja greške aproksimacija (3.10) kada mreža ne zadovoljava princip ortogonalnosti u odnosu na tenzor (v. Primer 2). Prema tome, shema je nekonzistentna što znači da dobijeno rešenje ne teži tačnom rešenju kada veličina svake ćelije teži nuli. U praksi je teško zadovoljiti princip ortogonalnosti, a nekada je to čak i nemoguće. Stoga se pristupa izradi robusnijih shema koje će biti drugog reda tačnosti i kada princip ortogonalnosti ne važi.

3.1.2 Nelinearna TPFA shema

U nelinearnoj TPFA shemi, slično kao i u linearnoj TPFA shemi cilj je predstaviti fluks (3.8) u obliku (3.11), ali tako da shema bude drugog reda tačnosti i kada ne važi uslov ortogonalnosti u odnosu na tenzor konstitutivne relacije.

Shema ovog tipa je prvi put formulisana na trougaonim mrežama u [45]. Generalizacija u slučaju anizotropnog i heterogenog tenzora je razvijena u [47]. U [48, 70] predstavljena je nelinearna TPFA shema za nestrukturnu mrežu sa zvezdolikim poligonalnim ćelijama. Ovaj pristup je proširen na trodimenzionalne poliedarske nestrukturne mreže u [18, 54]. Ubrzanje konvergencije kao i drugačiji tretman flukseva na Nojmanovoj granici dati su u [64]. U radovima [66, 69] shema je dodatno unapređena o čemu će više reči biti u Odeljku 3.3.

Numerički testovi pokazuju da su nelinearne TPFA sheme drugog reda tačnosti čak i za izrazito anizotropne tenzore i deformisane mreže, iako ne postoji formalni dokaz konvergencije [28]. Ove sheme ne zadovoljavaju diskretni princip maksimuma i minimuma, ali garantuju pozitivnost rešenja što će biti i pokazano u ovom poglavlju.

Za pomoćne tačke kolokacije uzimamo čvorove mreže u kojima je zadat Dirihleov granični uslov, kao i težišta strana na kojima je zadat Dirihleov granični uslov.

Hidraulički potencijal u okolini strane $f = \mathcal{T}^+ \cap \mathcal{T}^-$ možemo aproksimirati linearnom funkcijom na dva načina

$$h(\mathbf{x}) \approx h_{+} + \mathbf{G}_{f,+} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{+}), \qquad (3.25)$$

$$h(\mathbf{x}) \approx h_{-} + \mathbf{G}_{f,-} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{-}).$$
(3.26)

Zamenom relacije (3.25) u (3.8) dobijamo aproksimaciju fluksa

$$u_f^+ \approx u_{f,+} = -|f| \mathbf{n}_f^{\mathrm{T}} \mathbb{K}_f \mathbf{G}_{f,+}.$$
(3.27)

Nepoznati vektor $\mathbf{G}_{f,+}$ nalazimo rešavanjem linearnog sistema koji se sastoji od tri jednačine (dve u dvodimenzionalnom slučaju) oblika:

$$\mathbf{G}_{f,+} \cdot (\mathbf{x}_{\mathcal{T}} - \mathbf{x}_{+}) = h_{\mathcal{T}} - h_{+}, \quad \text{gde je } \mathcal{T} \in \mathcal{M},$$
(3.28)

$$\mathbf{G}_{f,+} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{+}) = g_{\mathrm{D}}(\mathbf{x}) - h_{+}, \quad \text{gde je } \mathbf{x} \in \Gamma_{\mathrm{D}}, \tag{3.29}$$

$$\mathbf{n}_{f_{\mathrm{N}}}^{\mathrm{T}} \mathbb{K}_{f_{\mathrm{N}}} \mathbf{G}_{f,+} = -g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{f_{\mathrm{N}}}), \quad \text{gde je } f_{\mathrm{N}} \subseteq \Gamma_{\mathrm{N}},$$
(3.30)

$$\left((\mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}} - \mathbf{x}_{+})^{\mathrm{T}} + \frac{1}{\Psi} \mathbf{n}_{f_{\mathrm{R}}}^{\mathrm{T}} \mathbb{K}_{f_{\mathrm{R}}} \right) \mathbf{G}_{f,+} = g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}}) - h_{+}, \quad \text{gde je } f_{\mathrm{R}} \subseteq \Gamma_{\mathrm{R}}, \qquad (3.31)$$

pri čemu je poslednja jednačina dobijena iz Robinovog graničnog uslova (2.53) i (3.25)

$$-\mathbf{n}_{f_{\mathrm{R}}}^{\mathrm{T}} \mathbb{K}_{f_{\mathrm{R}}} \mathbf{G}_{f,+} = \Psi(h_{+} + \mathbf{G}_{f,+} \cdot (\mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}} - \mathbf{x}_{+}) - g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}})).$$
(3.32)

Na ovaj način dolazimo do sistema

$$\mathfrak{MG}_{f,+} = \mathfrak{r}.\tag{3.33}$$

Stoga, aproksimacija fluksa (3.27) postaje

$$u_{f,+} = -|f|\mathbf{n}_f^{\mathrm{T}} \mathbb{K}_f \mathfrak{M}^{-1} \mathfrak{r} = -\boldsymbol{\alpha}^+ \cdot \mathfrak{r}, \qquad (3.34)$$

gde je

$$\boldsymbol{\alpha}^{+} = |f| \mathbf{n}_{f}^{\mathrm{T}} \mathbb{K}_{f} \mathfrak{M}^{-1}.$$
(3.35)

Jednačine koje čine sistem (3.33) treba izabrati tako da su elementi vektora α^+ nenegativni, tj. $\alpha_i^+ \ge 0$.

Aproksimaciju (3.34) možemo zapisati u obliku

$$u_{f,+} = -\sum_{i} \alpha_{i}^{+} (h_{i}^{+} - h_{+}) + \sum_{j} \alpha_{j}^{+} g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{j}^{+}).$$
(3.36)

Istim postupkom izvodimo aproksimaciju fluksa kroz stranu fu odnosu na ćeliju \mathcal{T}^-

$$u_{f,-} = -\sum_{k} \alpha_{k}^{-} (h_{k}^{-} - h_{-}) + \sum_{l} \alpha_{l}^{-} g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{l}^{-}).$$
(3.37)

Ideja je da se fluks predstavi konveksnom kombinacijom 5 ove dve aproksimacije

$$u_{f} \approx \mu_{+} u_{f,+} + \mu_{-}(-u_{f,-}) = -\mu_{+} \sum_{i} \alpha_{i}^{+} (h_{i}^{+} - h_{+}) + \mu_{+} \sum_{j} \alpha_{j}^{+} g_{N}(\mathbf{x}_{j}^{+}) + \mu_{-} \sum_{k} \alpha_{k}^{-} (h_{k}^{-} - h_{-}) - \mu_{-} \sum_{l} \alpha_{l}^{-} g_{N}(\mathbf{x}_{l}^{-})$$
(3.38)

gde je

$$\mu_{+} + \mu_{-} = 1, \quad \mu_{\pm} \ge 0. \tag{3.39}$$

Koeficijente μ_{\pm} tražimo tako da se potru sve diskretne vrednosti hidrauličkog potencijala osim onih u ćelijama \mathcal{T}^+ i \mathcal{T}^- i svi Nojmanovi granični uslovi koji su manji od nule (granica priliva). Drugim rečima zahtevamo da je

$$-\mu_+ d_+ + \mu_- d_- = 0, \tag{3.40}$$

⁵Konveksna kombinacija vektora \mathbf{v}_i predstavlja linearnu kombinaciju $\sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{v}_i$ pri čemu važi da je $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$ i $\lambda_i \ge 0$ za svako i.

gde je

$$d_{\pm} = \sum_{\substack{i\\i \neq \mathcal{T}^{\mp}}} \alpha_i^{\pm} h_i^{\pm} - \sum_{\substack{j\\g_N(\mathbf{x}_j) < 0}} \alpha_j g_N(\mathbf{x}_j^{\pm}).$$
(3.41)

Rešavanjem sistema sačinjenog od jednačina (3.39) i (3.40) dobijamo

$$\mu_{+} = \frac{d_{-}}{d_{-} + d_{+}}, \quad \mu_{-} = \frac{d_{+}}{d_{-} + d_{+}}$$
(3.42)

ako je $d_- + d_+ \neq 0$, a u suprotnom postavljamo $\mu_{\pm} = 0.5$. Na ovaj način dobijena je aproksimacija fluksa koja koristi samo dve diskretne vrednosti hidrauličkog potencijala

$$u_f \approx M_f^+ h_+ - M_f^- h_- + r_f,$$
 (3.43)

$$M_f^{\pm} = \mu_{\pm} \sum_i \alpha_i^{\pm} + \mu_{\mp} \sum_{\substack{k \\ \mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{\pm}}} \alpha_k^{\mp}, \qquad (3.44)$$

$$r_{f} = \mu_{+} \sum_{\substack{j \\ g_{N}(\mathbf{x}_{j}^{+}) > 0}} \alpha_{j}^{+} g_{N}(\mathbf{x}_{j}^{+}) - \mu_{-} \sum_{\substack{l \\ g_{N}(\mathbf{x}_{f_{l}}) > 0}} \alpha_{l}^{-} g_{N}(\mathbf{x}_{f_{l}}).$$
(3.45)

Primetimo da koeficijenti M_f^{\pm} zavise od diskretnih vrednosti hidrauličkih potencijala preko koeficijenata μ_{\pm} .

Fluks kroz stranu $f \subseteq \Gamma_{\rm N}$ aproksimiramo koristeći Nojmanov granični uslov:

$$u_f \approx |f| g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_f).$$
 (3.46)

Kada je na strani f zadat Dirihleov granični uslov, tu stranu možemo posmatrati kao ćeliju zapremine nula. Stoga fluks aproksimiramo formulom

$$u_f \approx M_f^{\mathcal{T}} h_{\mathcal{T}} - M_f^f g_{\rm D}(\mathbf{x}_f). \tag{3.47}$$

Slično i stranu f na kojoj je zadat Robinov granični uslov možemo posmatrati kao ćeliju zapremine nula. Kao i u linearnoj TPFA shemi fluks kroz stranu f aproksimiramo pomoću

$$u_f \approx \frac{|f|\Psi M_f^{\mathcal{T}}}{|f|\Psi + M_f^f} h_{\mathcal{T}} - \frac{|f|\Psi M_f^f}{|f|\Psi + M_f^f} g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_f).$$
(3.48)

Zamenom aproksimiranih vrednosti fluksa (3.43), (3.46), (3.47) i (3.48) u jednačini (3.4) dobijamo za svaku ćeliju $\mathcal{T} \in \mathcal{M}$

$$\sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} M_f^{\mathcal{T}} h_{\mathcal{T}} - \sum_{\substack{f \subset \partial \mathcal{T} \\ f = \partial \mathcal{T} \cap \partial L, L \in \mathcal{M}}} M_f^L h_L = |\mathcal{T}| q_{\mathcal{T}} + \sum_{f = \partial \mathcal{T} \cap \partial \Omega} \mathfrak{F}_f - \sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} r_f, \qquad (3.49)$$

pri čemu

$$\mathfrak{F}_{f} = \begin{cases} -|f|g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{f}), & \text{ako je } f \subseteq \Gamma_{\mathrm{N}}, \\\\ M_{f}^{f}g_{\mathrm{D}}(\mathbf{x}_{f}), & \text{ako je } f \subseteq \Gamma_{\mathrm{D}}, \\\\ \frac{|f|\Psi M_{f}^{f}}{|f|\Psi + M_{f}^{f}}g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_{f}) & \text{ako je } f \subseteq \Gamma_{\mathrm{R}}. \end{cases}$$
(3.50)

Za razliku od linearne TPFA sheme, gde su vrednosti M_f^{\pm} iste i zavise samo od mreže i tenzora K, u nelinearnoj TPFA shemi M_f^{\pm} zavise od koeficijenata μ_{\pm} koji preko d_{\pm} zavise od hidrauličkog potencijala u okolnim ćelijama (ne obavezno ćelijama koje su susedne ćelijama \mathcal{T}^+ i \mathcal{T}^-). Prema tome, za razliku od linearne TPFA sheme, u nelinearnoj TPFA shemi vrednosti M_f^{\pm} zavise od diskretnih vrednosti hidrauličkog potencijala. Stoga se ovakvom diskretizacijom dobija sistem nelinearnih jednačina

$$A(\mathbf{h})\mathbf{h} = \mathbf{b}(\mathbf{h}). \tag{3.51}$$

Ovakav sistem moguće je rešiti na različite načine, recimo Pikarovim metodom:

$$A(\mathbf{h}^n)\mathbf{h}^{n+1} = \mathbf{b}(\mathbf{h}^n). \tag{3.52}$$

Počevši od nekog početnog rešenja \mathbf{h}^0 , rešavanjem sistema linearnih jednačina dolazi se do sledeće iteracije. Ovaj postupak se nastavlja sve dok ne bude ispunjen kriterijum konvergencije

$$\frac{\|A(\mathbf{h}^n)\mathbf{h}^n - b(\mathbf{h}^n)\|}{\|\mathbf{h}^n\|} < \epsilon \tag{3.53}$$

za zadato ϵ , ili dok se ne dostigne zadati maksimalan broj iteracija.

Važi da je $\mathbf{h} > 0$, ako za svaki element vektora važi $h_i > 0$. Na isti način se definišu i relacije \langle , \leq , \geq za vektor kolone. Kada je $\mathbf{h}^n \geq 0$, na osnovu (3.41) koeficijenti d_{\pm} su nenegativni. Iz (3.42) dalje sledi $\mu_{\pm} \geq 0$, pa su i koeficijenti $M_f^{\pm} \geq 0$, što implicira da matrica $A(\mathbf{h}^n)$ ispunjava uslove Definicije 2. Egzistencija i jedinstvenost rešenja linearnog sistema (3.52) sledi iz činjenice da postoji inverz M-matrice.

Ne postoji formalni dokaz konvergencije nelinearne TPFA sheme, iako numerički primeri (v. Primeri 1 i 2) pokazuju da je shema prvog reda tačnosti za fluks i drugog reda za hidraulički potencijal. Kada je $g \ge 0$ i $g_N \le 0$ na osnovu diskretnog principa minimuma (Poglavlje 2.12) sledi da se minimum tačnog rešenja dostiže na $\Gamma_D \cup \Gamma_R$. Neka je $g_D \ge 0$ i $g_R \ge 0$. Potrebno je dokazati da je dobijeno numeričko rešenje nenegativno ($\mathbf{h}^{n+1} \ge 0$). Na desnoj strani jednačine (3.49) imamo da je $r_f = 0$, jer je $g_N \le 0$. Kako su i koeficijenti M_f^f u nenegativni sledi da je i \mathfrak{F} nenegativno. Iz ovoga sledi da su svi elementi vektora $\mathbf{b}(\mathbf{h}^n)$ nenegativni. Sa druge strane, matrica sistema $A(\mathbf{h}^n)$ je M-matrica, pa su svi elementi njenog inverza nenegativni [9]. Prema tome, ako je početno rešenje $\mathbf{h}^0 \ge 0$ onda i za svaku sledeću Pikarovu iteraciju važi $\mathbf{h}^n \ge 0$.

Na osnovu razmatranja u prethodnom pasusu, rešenje dobijeno nelinearnom TPFA shemom je nenegativno. Ovu osobinu možemo posmatrati kao globalni diskretni princip minimuma kada je tačno rešenje nenegativno i dostiže nulu na granici. Matrica sistema (3.52) nije dijagonalno dominantna pa ne zadovoljava uslove Teoreme 2. Stoga nelinearna TPFA shema ne poštuje lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma (v. 3).

Prednost nelinearne TPFA sheme u odnosu na linearnu je da je ona drugog reda tačnosti čak i za vrlo anizotropne tenzore i deformisane mreže. Ovakva robusnost nelinearne TPFA sheme je dobijena po cenu rešavanja nelinearnog sistema jednačina, čak i ako je polazni problem linearan.

3.1.3 TPFA shema za fluks kroz materijalni diskontinuitet

Slično kao i u slučaju strana na kojima je zadat Dirihleov ili Robinov granični uslov, stranu na materijalnom diskontinuitetu možemo tretirati kao ćeliju zapremine nula.

Istim izvođenjem koje je u slučaju linearne TPFA sheme dovelo do jednačine (3.11), odnosno u slučaju nelinearne TPFA sheme do (3.43), dolazimo do aproksimacija

$$u_f \approx N^+ h_+ - N_f^+ h_f + r_f^+, \quad u_f \approx -N^- h_- + N_f^- h_f - r_f^-,$$
 (3.54)

pri čemu je $r_f^\pm=0$ u linearnoj TPFA shemi. Kombinujući ove dve aproksimacije,

hidraulički potencijal h_f u strani f možemo izraziti formulom

$$h_f = \frac{N^+ h_+ + N^- h_- + r_f^+ + r_f^-}{N_f^+ + N_f^-}.$$
(3.55)

Eliminačijom h_f iz (3.54) dolažimo ponovo do aproksimacije uz pomoć dve tačke u obliku (3.43) pri čemu su:

$$M_f^{\pm} = \frac{N^{\pm}N^{\mp}}{N_f^{+} + N_f^{-}}, \quad r_f = \frac{N_f^{-}r_f^{+} - N_f^{+}r_f^{-}}{N_f^{+} + N_f^{-}}.$$
(3.56)

Na osnovu razmatranja iz prethodnog odeljka, koeficijenti N^{\pm} i N_f^{\pm} su pozitivni ako je $\mathbf{h}^n \geq 0$. Stoga su u tom slučaju i koeficijenti $M_f^{\pm} \geq 0$. Prema tome ovakva aproksimacija fluksa na materijalnom diskontinuitetu ne narušava pozitivnost rešenja.

Kada se diskontinuitet nalazi u blizini granice, da bi uopšte mogla da se nađe aproksimacija fluksa potrebno je uvesti dodatne pomoćne tačke kolokacije (na primer u središtima ivica). Tada će koeficijenti M_f^{\pm} zavisiti od diskretnih vrednosti hidrauličkog potencijala u ovim pomoćnim tačkama kolokacije. Vrednost hidrauličkog potencijala u pomoćnoj tački kolokacije moguće je naći interpolacijom iz okolnih tačaka. U [64] interpolacija je izvršena metodom najmanjih kvadrata. Nažalost u blizini diskontinuiteta tačnost ovakve metode je prvog reda.

U [66] je predstavljen algoritam koji ne narušava lokalni diskretni princip maksimuma i zadržava drugi red tačnosti. Ovaj pristup aproksimaciji fluksa preko materijalnog diskontinuiteta podrazumeva da se primeni lokalna deo po deo linearna koordinatna transformacija koja uklanja diskontinuitet. Ovakav metod je opisan u Odeljku 3.3.

3.2 Nelinearna MPFA shema

U MPFA shemama za aproksimaciju fluksa u strani koristi se više od dve tačke. Postoje različite linearne MPFA sheme, npr. O-metod [1], L-metod [2], itd. Međutim, u [42] je pokazano da na četvorougaonim mrežama nije moguće napraviti konzistentnu linearnu shemu uz pomoć devet tačaka koja zadovoljava diskretni princip maksimuma i minimuma za svaki tenzor. Nelinearna MPFA shema za trougaone mreže koja poštuje lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma opisana je u radu [46]. U radu [29] ova nelinearna MPFA shema je proširena na poligonalne, odnosno poliedarske ćelije u dve, odnosno tri dimenzije. Dalje je razvijana u radovima [34, 49].

Kao i u nelinearnoj TPFA shemi, ovde za pomoćne tačke kolokacije uzimamo čvorove mreže u kojima je zadat Dirihleov granični uslov i težišta strana na kojima je zadat Dirihleov ili Robinov granični uslov.

Da bi shema zadovoljavala lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma, dovoljno je da zadovoljava uslove Teoreme 2. Konstruišimo aproksimaciju fluksa kroz stranu $f \subset \partial \mathcal{T}$ u obliku

$$u_f^{\mathcal{T}} = \sum_i \nu_i (h_{\mathcal{T}} - h_i) + \sum_j \varrho_j |f| g_{\mathcal{N}}(\mathbf{x}_j), \qquad (3.57)$$

pri čemu je h_i vrednost hidrauličkog potencijala u tačkama kolokacije, odnosno $h_i = g_D(\mathbf{x}_i)$ ako $\mathbf{x}_i \in \Gamma_D$ ili $h_i = g_R(\mathbf{x}_i)$ ako je \mathbf{x}_i pomoćna tačka kolokacije na strani u kojoj je zadat Robinov granični uslov. Ako važi

$$\nu_i > 0$$
, kada je $f = \partial \mathcal{T}_i \cap \partial \mathcal{T}$, inace $\nu_i \ge 0$, (3.58)

i ako je $\rho_j \ge 0$ aproksimacija (3.57) zadovoljava uslove Teoreme 2.

Neka je strana $f = \partial \mathcal{T}^+ \cap \mathcal{T}^-$. Jednostrane aproksimacije (3.36) i (3.37) kroz stranu $f = \mathcal{T}^+ \cap \mathcal{T}^-$ možemo zapisati kao

$$u_{f,+} = \sum_{i} \alpha_{i}^{+}(h_{+} - h_{i}) + \alpha_{-}^{+}(h_{+} - h_{-}) + r_{f}^{+}, \quad r_{f}^{+} = \sum_{j} \alpha_{j}^{+}g_{N}(\mathbf{x}_{j}^{+})$$
(3.59)

$$u_{f,-} = \sum_{j} \alpha_{j}^{-} (h_{-} - h_{i}) + \alpha_{+}^{-} (h_{-} - h_{+}) + r_{f}^{-}, \quad r_{f}^{-} = \sum_{l} \alpha_{l}^{-} g_{N}(\mathbf{x}_{l}^{-})$$
(3.60)

pri čemu zahtevamo da je $\alpha_{\mp}^{\pm} > 0$. Ove aproksimacije možemo dalje zapisati u obliku

$$u_{f,+} = G^+ + \beta_+ (h_+ - h_-), \quad u_{f,-} = G^- + \beta_- (h_- - h_+)$$
 (3.61)

pri čemu je

$$G^{+} = \sum_{i} \alpha_{i}^{+} (h_{+} - h_{i}) + (\alpha_{-}^{+} - \beta_{+})(h_{+} - h_{-}) + r_{f}^{+},$$

$$G^{-} = \sum_{j} \alpha_{j}^{-} (h_{-} - h_{i}) + (\alpha_{+}^{-} - \beta_{-})(h_{-} - h_{+}) + r_{f}^{-},$$
(3.62)

Konstante $\beta_\pm>0$ biće razmatrane nešto kasnije u ovom poglavlju.

Za aproksimaciju fluksa kroz stranu f uzimamo konveksnu kombinaciju aproksimacija (3.61)

$$u_f \approx \mu_+ u_{f,+} + \mu_-(-u_{f,-}),$$
 (3.63)

$$\mu_{+} + \mu_{-} = 1, \quad \mu_{\pm} \ge 0. \tag{3.64}$$

Koeficijenti μ_{\pm} u nelinearnoj TPFA shemi birani su tako da se doprinosi svih ćelija osim \mathcal{T}^{\pm} ponište. Sa druge strane, u nelinearnoj MPFA shemi koeficijenti μ_{\pm} biraju se tako da se fluks može predstaviti u obliku (3.57) pri čemu važi (3.58). Doprinosi G^{\pm} mogu da naruše ovaj zahtev, pa ako bismo njih uspeli da eliminišemo onda bi važilo (3.58). Stoga, neka je

$$\mu_+ G^+ - \mu_- G^- = 0. \tag{3.65}$$

Rešavanjem sistema jednačina (3.64) i (3.65) dobijamo

$$\mu_{\pm} = \frac{G^{\mp}}{G^+ + G^-}.$$
(3.66)

Ukoliko je $G^+ + G^- = 0$, možemo postaviti $\mu_+ = \mu_- = 1/2$. Nažalost, G^+ i $G^$ mogu biti različitog znaka, pa stoga nije zadovoljen uslov $\mu_{\pm} \ge 0$. Prema tome, potrebno je koeficijente μ_{\pm} pronaći na drugi način. Neka su:

$$\mu_{\pm} = \frac{|G^{\mp}|}{|G^{+}| + |G^{-}|},\tag{3.67}$$

odnosno $\mu_{+} = \mu_{-} = 1/2$, ako je $|G^{+}| = |G^{-}| = 0$.

Na osnovu (3.61) i (3.67) fluks (3.63) je moguće napisati u obliku

$$u_{f} \approx (\mu_{+}\beta_{+} + \mu_{-}\beta_{-})(h_{+} - h_{-}) + \mu_{+}G^{+} - \mu_{-}G^{-}$$

$$= \frac{|G^{-}|\beta_{+} + |G^{+}|\beta_{-}}{|G^{+}| + |G^{-}|}(h_{+} - h_{-}) + \frac{|G^{-}|G^{+} - |G^{+}|G^{-}|}{|G^{+}| + |G^{-}|}.$$
(3.68)

U zavisnosti od znaka G^+G^- imamo dva slučaja.

• Kada je $G^+G^- \geq 0$ aproksimacija fluksa se svodi na

$$u_f \approx \frac{|G^-|\beta_+ + |G^+|\beta_-}{|G^+| + |G^-|} (h_+ - h_-).$$
(3.69)

U jednačini (3.4) na osnovu (3.7) važi $u_f^+ = u_f$ za ćeliju \mathcal{T}^+ , odnosno $u_f^- = -u_f$ za ćeliju \mathcal{T}^- . Formula (3.69) je oblika (3.57), pa kako je $\beta_{\pm} > 0$ ispunjen je zahtev (3.58).

• Kada je $G^+G^- < 0$ onda važi $|G^-|G^+ - |G^+|G^- = 2|G^-|G^+ = -2G^-|G^+|$, pa je aproksimacija fluksa (3.68) u strani f za ćeliju \mathcal{T}^+

$$u_{f}^{+} = u_{f} \approx \frac{|G^{-}|\beta_{+} + |G^{+}|\beta_{-}|}{|G^{+}| + |G^{-}|} (h_{+} - h_{-}) + \frac{2|G^{-}|G^{+}|}{|G^{+}| + |G^{-}|} \\ = \frac{|G^{-}|\beta_{+} + |G^{+}|\beta_{-}|}{|G^{+}| + |G^{-}|} (h_{+} - h_{-}) \\ + \frac{2|G^{-}|}{|G^{+}| + |G^{-}|} \left(\sum_{i} \alpha_{i}^{+}(h_{+} - h_{i}) + (\alpha_{-}^{+} - \beta_{+})(h_{+} - h_{-}) + r_{f}^{+} \right)$$
(3.70)
$$= \frac{(h_{+} - h_{-})}{|G^{+}| + |G^{-}|} \left(|G^{-}|(2\alpha_{-}^{+} - \beta_{+}) + |G^{+}|\beta_{-} \right) \\ + \frac{2|G^{-}|}{|G^{+}| + |G^{-}|} \left(\sum_{i} \alpha_{i}^{+}(h_{+} - h_{i}) + r_{f}^{+} \right),$$

odnosno za ćeliju \mathcal{T}^-

$$\begin{split} u_{f}^{-} &= -u_{f} \approx \frac{|G^{-}|\beta_{+} + |G^{+}|\beta_{-}}{|G^{+}| + |G^{-}|} (h_{-} - h_{+}) + \frac{2|G^{+}|G^{-}|}{|G^{+}| + |G^{-}|} \\ &= \frac{|G^{-}|\beta_{+} + |G^{+}|\beta_{-}}{|G^{+}| + |G^{-}|} (h_{-} - h_{+}) \\ &+ \frac{2|G^{+}|}{|G^{+}| + |G^{-}|} \left(\sum_{j} \alpha_{j}^{-} (h_{-} - h_{i}) + (\alpha_{+}^{-} - \beta_{-})(h_{-} - h_{+}) + r_{f}^{-} \right) \quad (3.71) \\ &= \frac{(h_{-} - h_{+})}{|G^{+}| + |G^{-}|} \left(|G^{+}|(2\alpha_{+}^{-} - \beta_{-}) + |G^{-}|\beta_{+} \right) \\ &+ \frac{2|G^{+}|}{|G^{+}| + |G^{-}|} \left(\sum_{j} \alpha_{j}^{-} (h_{-} - h_{i}) + r_{f}^{-} \right). \end{split}$$

Aproksimacije (3.70) i (3.71) zadovoljavaju lokalno održanje, tj. važi da je $u_f^+ = -u_f^-$. Ukoliko je ispunjeno $0 < \beta_+ \le 2\alpha_-^+$ i $0 < \beta_- \le 2\alpha_+^-$, aproksimacije (3.70) i (3.71) su u zahtevanom obliku (3.58).

Fluks neprekidno zavisi od hidrauličkog potencijala. U radovima [28, 29] je pokazano da je ovo svojstvo garantovano ako se uzme jedinstveno $\beta = \beta_{-} = \beta_{+} = 2\min(\alpha_{-}^{+}, \alpha_{+}^{-}).$

Kada je Nojmanov granični uslov zadat na stranifonda fluks aproksimiramo kao

$$u_f \approx |f|g_{\rm N}(\mathbf{x}_f). \tag{3.72}$$

Stranu na kojoj je zadat Dirihleov granični uslov možemo posmatrati kao ćeliju zapremine nula. Aproksimacija fluksa je tada

$$u_f \approx M_f^{\mathcal{T}} h_{\mathcal{T}} - M_f^f g_{\mathrm{D}}(\mathbf{x}_f).$$
(3.73)

Slično, strane f gde je zadat Robinov granični uslov možemo posmatrati kao ćelije zapremine nula. Kao i u linearnoj TPFA shemi, aproksimaciju fluksa je data kao

$$u_f \approx \frac{|f|\Psi M_f^{\mathcal{T}}}{|f|\Psi + M_f^f} h_{\mathcal{T}} - \frac{|f|\Psi M_f^f}{|f|\Psi + M_f^f} g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_f).$$
(3.74)

Diskretizacija fluksa u stranama gde postoji diskontinuitet izvedena je na način opisan u Odeljku 3.3.

Veličine $|G^+|$ i $|G^-|$ zavise od vrednosti hidrauličkog potencijala. Stoga se diskretizacijom opisanom u ovom poglavlju dolazi do sistema nelinearnih jednačina

$$A(\mathbf{h})\mathbf{h} = \mathbf{b}(\mathbf{h}). \tag{3.75}$$

Matrica $A(\mathbf{h})$ ispunjava uslove Definicija 2. i 3. pa je to dijagonalno dominantna Mmatrica. Stoga, na osnovu Teoreme 2. nelinearna MPFA shema zadovoljava lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma.

Nelinearna MPFA shema je prvog reda tačnosti za fluks, a drugog za hidraulički potencijal (v. Primer 1). Pod određenim uslovima postoji dokaz konvergencije ovakve sheme [29].

Kao i nelinearna TPFA shema, nelinearna MPFA shema je takođe drugog reda tačnosti čak i za vrlo anizotropne tenzore i deformisane mreze (v. Primer 2). Ovo svojstvo je dobijeno po ceni rešavanja nelinearnog sistema čak i ako je problem linearan. Prednost ove sheme u odnosu na nelinearnu TPFA shemu je u tome da ona poštuje lokalni diskretni princip maksimuma (v. Primer 3). Matrica sistema (3.75) je retka, najčešće sa nešto više ne-nula vrednosti nego u nelinearnoj TPFA shemi. Ako mreža zadovoljava određene uslove [49] onda broj ne-nula vrednosti može biti isti kao i u nelinearnoj TPFA shemi.

Jednu varijantu linearne MPFA sheme je moguće dobiti tako što ćemo uzeti $\mu_{\pm} = 0.5$. Ovakva shema je prvog reda tačnosti za fluks i drugog reda za hidraulički potencijal (v. Primer 1 i 2), ali ne daje M-matricu i ne zadovoljava diskretni princip minimuma i maksimuma (v. Primer 3).

3.3 Uklanjanje diskontinuiteta na stranama lokalnom koordinatnom transformacijom

Tačnu diskretizaciju fluksa na stranama gde postoji diskontinuitet u tenzoru konstitutivne relacije ponekad nije moguće konstruisati korišćenjem samo vrednosti hidrauličkog potencijala u primarnim tačkama kolokacije (težišta ćelija) i pomoćnim u stranama. Tada je potrebno na neki način izračunati vrednost hidrauličkog potencijala u pojedinim ivicama ili čvorovima. Primera radi, u [18] vrednost u ivicama interpolirana je aritmetičkom sredinom. Rešenje dobijeno na ovaj način je pozitivno, ali je prvog reda tačnosti. Slično, u [64] je vrednost u čvorovima dobijena metodom najmanjih kvadrata, garantovana je pozitivnost rešenja, ali je tačnost prvog reda na diskontinuitetu.

U radu [66] vrednosti hidrauličkog potencijala u čvorovima mreže dobijaju se interpolacijom koristeći deo po deo linernu transformaciju. Ovakav pristup ne narušava lokalni diskretni princip maksimuma i ne smanjuje red tačnosti metode. Ista lokalna transformacija je u [69] iskorišćena za direktnu aproksimaciju fluksa, čime je izbegnuto korišćenje pomoćnih tačaka kolokacije i interpoliranje vrednosti u njima.

Obeležimo sa $U(\mathbf{x}_0)$ okolinu neke tačke $\mathbf{x}_0 \in \Omega$. Neka se ona sastoji od slojeva $U_{-m}, \ldots, U_n, m \ge 0, n \ge 0$, pri čemu je materijalni diskontinuitet $\overline{U}_i \cap \overline{U}_{i+1}$ glatka površ koju aproksimiramo pomoću ravni (slika 3.3).



Slika 3.3: Lokalna slojevitost okoline tačke \mathbf{x} .

Pretpostavimo da je tenzor K neprekidan unutar svakog sloja, dok između slojeva može da ima prekide. Uvedimo lokalnu aproksimaciju $\mathbb{K}(\mathbf{x}) = \mathbb{K}_i$ kada je $\mathbf{x} \in U_i$.

Potražimo deo po deo linearnu aproksimaciju hidrauličkog potencijala u obliku

$$h(\mathbf{x}) = h_i + \mathbf{G}_i \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \quad \mathbf{x} \in U_i.$$
(3.76)

Kako imamo m + n + 1 slojeva, prethodna jednačina ima $4 \cdot (m + n + 1)$ stepena slobode u trodimenzionalnom slučaju.

Hidraulički potencijal je neprekidna funkcija. Stoga na materijalnom diskontinuitetu za prethodnu aproksimaciju mora da važi

$$h_{i-1} + \mathbf{G}_{i-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = h_i + \mathbf{G}_i \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \quad \text{za svako } \mathbf{x} \in \overline{U}_i \cap \overline{U}_{i-1}.$$
(3.77)

Na osnovu zakona održanja na materijalnom diskontinuitetu mora da važi

$$-\mathbf{n}_{i-1,i}^{\mathrm{T}}\mathbb{K}_{i-1}\mathbf{G}_{i-1} = -\mathbf{n}_{i-1,i}^{\mathrm{T}}\mathbb{K}_{i}\mathbf{G}_{i}.$$
(3.78)

gde je $\mathbf{n}_{i-1,i}$ jedinični vektor normalan na $\overline{U}_i \cap \overline{U}_{i+1}$ usmeren od sloja sa manjim apsolutnim indeksom ka sloju sa većim apsolutnim indeksom. Zbog lakše notacije obeležimo $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_{i-1,i}$ za pozitivne indekse *i*, odnosno $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_{i,i+1}$ za negativne *i* (slika 3.3).

Materijalnih diskontinuiteta ima (n + m) i na njima su definisani uslovi (3.77) i (3.78). Uslov (3.77) eliminiše tri stepena slobode, dok uslov (3.78) eliminiše jedan stepen slobode. Stoga, ovi uslovi eliminišu sve osim četiri stepena slobode funkcije (3.76)

$$h(\mathbf{x}) = h_0 + \mathbf{G}_0 \cdot F(\mathbf{x}), \tag{3.79}$$

pri čemu je $F : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ deo po deo linearna transformacija izvedena u Dodatku A. Transformacija $F(\mathbf{x})$ ne zavisi od hidrauličkog potencijala, već samo od tenzora K i geometrije modela.

Formula (3.79) je u [66] iskorišćena za interpoliranje vednosti hidrauličkog potencijala u tačkama. U [69] formula (3.79) se koristi direktno za aproksimaciju fluksa kroz neku stranu f i taj pristup je opisan u nastavku.

Neka strana f sa težištem \mathbf{x}_f pripada ćeliji \mathcal{T} i neka je njena normala \mathbf{n}_f usmerena van ćelije \mathcal{T} . Za tačku \mathbf{x}_0 u jednačini (3.76) uzimamo težište $\mathbf{x}_{\mathcal{T}}$, pa je $h_0 = h_{\mathcal{T}}$. Komponente vektora \mathbf{G}_0 pronalazimo rešavanjem linearnog sistema

$$\mathfrak{M}\mathbf{G}_0 = \mathfrak{r},\tag{3.80}$$

koji se sastoji od tri jednačine (dve u dvodimenzionalnom slučaju) sledećeg tipa:

$$F(\mathbf{x}_K) \cdot \mathbf{G}_0 = h_K - h_{\mathcal{T}}$$
 ako je $K \in \mathcal{M}$ (3.81)

$$F(\mathbf{x}_n) \cdot \mathbf{G}_0 = g_{\mathrm{D}}(\mathbf{x}_n) - h_{\mathcal{T}}$$
 ako je $\mathbf{x}_n \in \Gamma_{\mathrm{D}},$ (3.82)

$$\mathbf{n}_{f}^{\mathrm{T}}\mathbb{K}_{f}(\mathbf{x}_{f})\nabla F(\mathbf{x}_{f})\mathbf{G}_{0} = -g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{f}) \quad \text{ako je } f \subseteq \Gamma_{\mathrm{N}},$$
(3.83)

$$\left(F(\mathbf{x}_f)^{\mathrm{T}} + \frac{1}{\Psi}\mathbf{n}_f^{\mathrm{T}}\mathbb{K}_f(\mathbf{x}_f)\nabla F(\mathbf{x}_f)\right)\mathbf{G}_0 = g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_f) - h_{\mathcal{T}} \quad \text{ako je } f \subseteq \Gamma_{\mathrm{R}}.$$
 (3.84)

Poslednju jednačinu dobijamo iz Robinovog graničnog uslova (2.53)

$$-\mathbf{n}_{f}^{\mathrm{T}}\mathbb{K}_{f}(\mathbf{x}_{f})\nabla F(\mathbf{x}_{f})\mathbf{G}_{0} = \Psi\left(h_{\mathcal{T}} + \mathbf{G}_{0}\cdot F(\mathbf{x}_{f}) - g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_{f})\right).$$
(3.85)

Kada ovakav sistem ima jedinstveno rešenje, fluks kroz stranu f je moguće predstaviti kao

$$u_f \approx -|f| \left(\mathbb{K}_f(\mathbf{x}_f) \mathfrak{M}^{-1} \mathfrak{r} \right) \mathbf{n}_f = -|f| \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathfrak{r}, \qquad (3.86)$$

jer je $f\subset \overline{U}_0$ i $\nabla F\equiv \mathbb{I}$ na $U_0.$ Vektor koeficijenata $\pmb{\alpha}$ je

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{n}_f^{\mathrm{T}} \mathbb{K}_f(\mathbf{x}_f) \mathfrak{M}^{-1}. \tag{3.87}$$

Jednačine koje čine sistem (3.80) je potrebno izabrati tako da su sve koordinate vektora $\boldsymbol{\alpha}$ nenegativne.

U Primerima 4 i 5 pokazano je da ovakav pristup ne narušava lokalni diskretni princip maksimuma i ne smanjuje red tačnosti metode.

3.4 Diskretizacija bunara

Podzemno strujanje koje je od interesa u inženjerskoj praksi često je prouzrokovano radom bunara. Hidrogeološki gledano, namena bunara je eksploatacija ili osmatranje podzemnih voda.

Perforirani deo zida bunara koji omogućava dotok vode iz podzemne sredine u unutrašnjost bunara nazivamo filter. Duž filtera usled različitih uticaja (mehaničkih, hemijskih i bioloških) dolazi do delimičnog zapušavanja (kolmiranja)⁶. Ovo uzrokuje dodatan hidraulički otpor, pa je intenzitet Darsijeve brzine kroz filter

$$u = \Psi(h_r - h_w), \tag{3.88}$$

pri čemu je $h_{\rm w}$ hidraulički potencijal unutar bunara, h_r hidraulički potencijal u podzemnoj sredini tik do filtra bunara (slika 3.4), $\Psi = K_{\rm k}/d_{\rm k}$ koeficijent transfera, a $K_{\rm k}$ i $d_{\rm k}$ koeficijent filtracije i debljina kolmiranog sloja, respektivno.



Slika 3.4: Dodatni hidraulički otpor duž zida bunara.

Hidraulički potencijal se menja logaritamski sa udaljenošću od bunara (slika 3.4), što će biti objašnjeno u Odeljku 3.4.1. Gradijent hidrauličkog potencijala se u okolini bunara brzo menja, pa tu klasične sheme na grubim mrežama rezultuju velikim gubitkom tačnosti. U situacijama kada strujanje u podzemnoj sredini uglavnom zavisi od prisustva bunara, netačno modeliranje u okolini bunara ima za posledicu gubitak tačnosti u celom domenu.

Lokalno profinjenje mreže može pomoći, ali je problem u tome da je u praksi prečnik bunara najčešće mnogo manji od okolnih ćelija. Stoga je potrebno dosta

 $^{^{6}}$ U literaturi na engleskom jeziku ovakva pojava se obično opisuje terminom $skin \ effect$

profiniti mrežu da bi se dobilo zadovoljavajuće rešenje, što ima za posledicu veće korišćenje računarskih resursa.

Metode za modeliranje i diskretizaciju bunara razmatrane su u više radova [14, 23, 24, 27, 26, 53, 56, 57]. Najčešće upotrebljavani način za diskretizaciju bunara je Pismanova korekcija [56, 57]. Ovakav pristup, prvobitno formulisan za konačne razlike sa bunarom u centru ćelije, kasnije je proširen i na druge metode diskretizacije (pregled videti u radu [14]). Ovaj metod daje korektan proticaj kroz bunar i smanjuje grešku u hidrauličkom potencijalu, ali hidraulički potencijal i dalje nije čak ni prvog reda tačnosti na grubljim mrežama.

U radu [27] predstavljene su dve metode za diskretizaciju kada je bunar modeliran zasebnim ćelijama. U radu [26] predstavljeno je proširenje ovih metoda na neizotropnu sredinu. Aproksimacija fluksa WFC⁷ metodom (dvodimenzionalni slučaj predstavljen u Odeljku 3.4.2) je slična Pismanovom modelu i koriguje aproksimaciju fluksa na bunarskim stranama. Ona daje mnogo tačniji proticaj kroz bunar, ali nije čak ni prvog reda tačnosti na grubim mrežama. Aproksimacija fluksa NWC⁸ metodom (dvodimenzionalni slučaj predstavljen u Odeljku 3.4.3) koriguje aproksimacije fluksa u nekoj okolini bunara, što daje drugi red tačnosti. U Odeljku 3.4.4 predstavljeno je proširenje na trodimenzionalni slučaj.



Slika 3.5: Diskretizacija bunara u dve (levo) i tri (desno) dimenzije.

Bunar je predstavljen nizom cilindričnih ćelija u trodimenzionalnom slučaju, odnosno jednom kružnom ćelijom u dve dimenzije (slika 3.5). U trodimenzionalnom

 $^{^7\}mathrm{WFC}$ - skraćenica od termina na engleskom jeziku $well \; face \; correction$

 $^{^{8}\}mathrm{NWC}$ - skraćenica od termina na engleskom jeziku near well correction

slučaju granični uslov u bunaru se postavlja na najnižoj strani najniže ćelije, zato što ta strana presušuje tek kada presuši i ceo bunar. Tok unutar bunara je modeliran Hagen-Poisilovim zakonom, što znači da je koeficijent filtracije duž bunara zadat relacijom

$$K_{\rm b} = \frac{r^2 \rho g}{8\mu},\tag{3.89}$$

pri čemu je r poluprečnik bunara, ρ je gustina vode unutar bunara, g je gravitaciona konstanta i μ je dinamička viskoznost vode. Fluks kroz stranu f između dve bunarske ćelije (\mathcal{T}^{\pm}) aproksimiramo linearnom TPFA shemom

$$u_f = |f||K_{\rm b}|\frac{h_+ - h_-}{\|\mathbf{x}_- - \mathbf{x}_+\|}.$$
(3.90)

Ovakva aproksimacija je drugug reda tačnosti i zadovoljava lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma ako je bunar prav, jer je na stranama između dve bunarske ćelije zadovoljen uslov ortogonalnosti.

Strane koje se nalaze između ćelija bunara i ćelija porozne sredine nazivamo bunarskim stranama (slika 3.5).

U dvodimenzionalnom slučaju kada je zadat bunarski proticaj, bunar se modelira kao term izvora i ponora, dok je u slučaju kada je zadat nivo bunar predstavljen kao kružna rupa na čijoj granici je zadat Robinov granični uslov.

3.4.1 Analitičko rešenje

Posmatrajmo problem u dve dimenzije. Neka se bunar poluprečnika r nalazi u centru kružnog domena poluprečnika R. Neka je domen homogen i izotropan sa tenzorom filtracije $\mathbb{K} = K\mathbb{I}$. Prelaskom na polarne koordinate

$$x - x_{w} = \rho \sin \vartheta, \quad y - y_{w} = \rho \cos \vartheta,$$
 (3.91)

možemo dobiti opšte rešenje jednačine (2.27) metodom razdvajanja promenljivih

$$h = (C_0 \ln \rho + C_1)(D_0 \vartheta + 1) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(A_n \rho^n + B_n \rho^{-n} \right) \left(D_n \cos n\vartheta + \sin n\vartheta \right), \quad (3.92)$$

pri čemu su A_n, B_n, C_0, C_1 i D_n konstante, dok je $\rho = \rho(\mathbf{x})$ udaljenost tačke \mathbf{x} od centra bunara \mathbf{x}_w :

$$\rho(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{w}\|. \tag{3.93}$$

Iz uslova da rešenje ne zavisi od ϑ dobijamo

$$h = C_0 \ln \rho + C_1. \tag{3.94}$$

Ako su h_r i h_R vrednosti hidrauličkog potencijala u poroznoj sredini na rastojanjima r i R od centra bunara onda je rešenje

$$h = \frac{h_R - h_r}{\ln \frac{R}{r}} \ln \rho + \frac{h_r \ln R - h_R \ln r}{\ln \frac{R}{r}},$$
(3.95)

dok je ukupni proticaj kroz bunar

$$Q = 2\pi K \frac{h_R - h_r}{\ln \frac{R}{r}}.$$
(3.96)

Razmotrimo šta se dešava u anizotropnom slučaju. Tenzor filtracije \mathbb{K} je simetrična pozitivno definitna matrica te stoga važi

$$\mathbb{K} = ADA^{\mathrm{T}},\tag{3.97}$$

gde je A matrica sopstvenih vektora matrice \mathbb{K} i $D = \text{diag}(d_1, d_2)$ dijagonalna matrica čiji su elementi sopstvene vrednosti matrice \mathbb{K} . Zbog pozitivne definitnosti matrice \mathbb{K} sve njene sopstvene vrednosti su pozitivne. Prema tome

$$\mathbb{K} = A\sqrt{D}\sqrt{D}A^{\mathrm{T}}, \quad \sqrt{D} = \mathrm{diag}(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2})$$
(3.98)

odnosno

$$\mathbb{K} = \mathcal{S}^{-1}(\mathcal{S}^{-1})^{\mathrm{T}}, \quad \text{gde je } \mathcal{S} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} = (A\sqrt{D})^{-1}.$$
 (3.99)

Definišimo koordinatnu transformaciju

$$\overline{\mathbf{x}} = \mathcal{S}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{w}). \tag{3.100}$$

Gradijent hidrauličkog potencijala je moguće predstaviti kao

$$\nabla h = \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial x} \\ \frac{\partial h}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial \overline{x}} \frac{\partial \overline{x}}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial \overline{y}} \frac{\partial \overline{y}}{\partial x} \\ \frac{\partial h}{\partial \overline{x}} \frac{\partial \overline{x}}{\partial y} + \frac{\partial h}{\partial \overline{y}} \frac{\partial \overline{y}}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} \frac{\partial h}{\partial \overline{x}} + S_{21} \frac{\partial h}{\partial \overline{y}} \\ S_{12} \frac{\partial h}{\partial \overline{x}} + S_{22} \frac{\partial h}{\partial \overline{y}} \end{bmatrix} = \mathcal{S}^{\mathrm{T}} \overline{\nabla} h, \qquad (3.101)$$

gde je

$$\overline{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial \overline{x}}, \frac{\partial}{\partial \overline{y}}\right) \tag{3.102}$$

nabla operator u novom koordinatnom sistemu. Divergenciju proizvoljnog vektora $\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 \end{bmatrix}^T$ je moguće predstaviti kao

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_1}{\partial x} + \frac{\partial v_2}{\partial y} = S_{11} \frac{\partial v_1}{\partial \overline{x}} + S_{21} \frac{\partial v_1}{\partial \overline{y}} + S_{12} \frac{\partial v_2}{\partial \overline{x}} + S_{22} \frac{\partial v_2}{\partial \overline{y}} = \overline{\nabla} \cdot (\mathcal{S} \mathbf{v}). \quad (3.103)$$

Prema tome, stacionarna jednačina podzemnog strujanja u zasićenoj sredini (2.27) u novim koordinatama glasi

$$\nabla \cdot (\mathbb{K}\nabla h) = \overline{\nabla} \cdot \left(\mathcal{S}\mathbb{K}\mathcal{S}^T\overline{\nabla}h\right).$$
(3.104)

Zamenom (3.99) u poslednjoj jednačini dobijamo da je jednačina podzemnog strujanja

$$\overline{\nabla} \cdot (\overline{\nabla}h) = q. \tag{3.105}$$

Stoga je rešenje oblika

$$h = C_0 \ln \overline{\rho} + C_1. \tag{3.106}$$

Na ovaj način koordinatnom transformacijom problem je postao izotropan. Ako je u novim koordinatama domen kružan sa konstantnim hidrauličkim potencijalom h_R na udaljenosti (u novim koordinatama) R od centra bunara, odnosno h_r na udaljenosti r, slično kao i u izotropnom slučaju rešenje je

$$h = \frac{h_R - h_r}{\ln \frac{R}{r}} \ln \overline{\rho}(\mathbf{x}) + \frac{h_r \ln R - h_R \ln r}{\ln \frac{R}{r}},$$
(3.107)

pri čemu je

$$\overline{\rho}(\mathbf{x}) = \|\mathcal{S}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{w})\| = \|\overline{\mathbf{x}}\|.$$
(3.108)

Ukupni proticaj kroz bunar je

$$Q = 2\pi |\det(\mathcal{S}^{-1})| \frac{h_R - h_r}{\ln \frac{R}{r}}.$$
 (3.109)

Primetimo da se ova formula svodi na (3.96) kada je u izotropnom slučaju $\mathbb{K} = K\mathbb{I}$, gde je K pozitivna skalarna vrednost. Dekompoziciju (3.98) u tom slučaju možemo zapisati kao

$$\mathbb{K} = \mathbb{I}\sqrt{K}\sqrt{K}\mathbb{I}^{\mathrm{T}},\tag{3.110}$$

dok je $\mathcal{S}^{-1} = \mathbb{I}\sqrt{K}$, pa je $|\det(\mathcal{S}^{-1})| = K$.

3.4.2 WFC korekcija

Na osnovu proticaja (3.109) u [26] je predloženo da se fluks na bunarskim stranama aproksimira kao

$$u_f \approx |\Pr(f)|_{\mathcal{S}} |\det(\mathcal{S}^{-1})| \frac{h_{\mathcal{T}} - h_f}{r \ln \frac{\overline{\rho}(\mathbf{x}_{\mathcal{T}})}{\overline{\rho}(\mathbf{x}_f)}},$$
(3.111)

gde je h_f vrednost hidrauličkog potencijala u pomoćnoj tački kolokacije \mathbf{x}_f , a $\Pr(f)$ je centralna projekcija strane f na skup $\|\overline{\mathbf{x}}\| = r$ iz centra bunara $\overline{\mathbf{x}}_w$. Sa $|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}$ je označena dužina projekcije u novom koordinatnom sistemu. Ovakva aproksimacija se u izotropnom slučaju svodi na aproksimaciju razmatranu u [27]

$$u_f \approx |f| K \frac{h_{\mathcal{T}} - h_f}{r \ln \frac{\rho(\mathbf{x}_{\mathcal{T}})}{\rho(\mathbf{x}_f)}}.$$
(3.112)

Na osnovu (3.88) imamo da je fluks na bunarskim stranama

$$u_f = |f|\Psi(h_f - h_w), (3.113)$$

pri čemu je $h_{\rm w}$ vrednost hidrauličkog potencijala u bunarskoj ćeliji. Iz prethodne jednačine i jednačine (3.111) dobijamo

$$u_f = \frac{|f||\Pr(f)|_{\mathcal{S}}|\det(\mathcal{S}^{-1})|\Psi}{|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}|\det(\mathcal{S}^{-1})| + |f|\Psi r \ln \frac{\overline{\rho}(\mathbf{x}_{\mathcal{T}})}{\overline{\rho}(\mathbf{x}_f)}} (h_{\mathcal{T}} - h_{w}).$$
(3.114)

Vrednost ln $\frac{\overline{\rho}(\mathbf{x}_T)}{\overline{\rho}(\mathbf{x}_f)}$ je uvek pozitivna jer je bez obzira na koordinatnu transformaciju uvek ispunjeno $\overline{\rho}(\mathbf{x}_T) > \overline{\rho}(\mathbf{x}_f) > 0$, te je zbog toga ceo razlomak u (3.114) pozitivan. Ovakva korekcija ne narušava dobijanje M-matrice pa je primenjiva i na linearnu TPFA i linearnu MPFA shemu. Takođe, korišćenjem ovakve aproksimacije na bunarskim stranama uz nelinearnu TPFA shemu dobija se M-matrica i poštuje se pozitivnost rešenja (Odeljak 3.1.2). Osim što su koeficijenti ovakve aproksimacije pozitivni oni su i jednaki, pa zadovoljavaju uslov (3.58). Stoga se ovakva aproksimacija može primeniti u nelinearnoj MPFA shemi i lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma će i dalje biti zadovoljen.

Ovakva aproksimacija fluksa na bunarskim stranama daje korektan proticaj u bunaru, ali u okolini bunara hidraulički potencijal i dalje nije čak ni prvog reda tačnosti na grubim mrežama, iako je mnogo tačniji nego bez korekcije (v. Primere 6 i 7).

3.4.3 NWC korekcija

Ideja NWC korekcije [26, 27] je da se hidraulički potencijal u okolini bunara predstavi kao

$$h \approx L + \hat{h},\tag{3.115}$$

gde je L linearna funkcija, dok je \hat{h} bunarska funkcija oblika (3.106)

$$\hat{h} = C_0 \ln \overline{\rho}(\mathbf{x}) + C_1. \tag{3.116}$$

Stoga se gradijent hidrauličkog potencijala može predstaviti kao zbir linearnog i singularnog dela

$$\nabla h \approx \mathbf{G} + C_0 \nabla \left(\ln \overline{\rho}(\mathbf{x}) \right).$$
 (3.117)

Integracijom jednačine podzemnog strujanja (2.27) po svakoj ćeliji $\mathcal{T} \in \mathcal{M}$ dobijamo

$$\int_{\mathcal{T}} \nabla \cdot (-\mathbb{K}\nabla h) \mathrm{d}\Omega \approx -\int_{\mathcal{T}} \nabla \cdot (\mathbb{K}\mathbf{G}) \mathrm{d}\Omega - C_0 \int_{\mathcal{T}} \nabla \cdot (\mathbb{K}\nabla(\ln\overline{\rho}(\mathbf{x}))) \mathrm{d}\Omega.$$
(3.118)

Kako je L linearna funkcija, **G** je konstanta. Primenom Teoreme o divergenciji na prvi integral dobijamo

$$\int_{\mathcal{T}} \nabla \cdot (\mathbb{K}\mathbf{G}) \mathrm{d}\Omega = \int_{\partial \mathcal{T}} (\mathbb{K}\mathbf{G}) \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S \approx \sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} |f| (\mathbb{K}_f \mathbf{G}_f) \cdot \mathbf{n}_f.$$
(3.119)

Primetimo da je ova aproksimacija dobra čak i za bunarsku stranu, jer integral ne zavisi od putanje.

Koordinatnom transformacijom (3.100) i primenom Teoreme o divrgenciji drugi integral postaje

$$C_{0} \int_{\mathcal{T}} \nabla \cdot \left(\mathbb{K} \nabla (\ln \overline{\rho}(\mathbf{x})) \right) d\Omega = C_{0} |\det(\mathcal{S}^{-1})| \int_{\mathcal{T}} \overline{\nabla} \cdot \left(\overline{\nabla} (\ln \overline{\rho}(\mathbf{x})) \right) d\overline{\Omega} =$$

= $C_{0} |\det(\mathcal{S}^{-1})| \int_{\partial \mathcal{T}} \left(\overline{\nabla} (\ln \overline{\rho}(\mathbf{x})) \right) \cdot \overline{\mathbf{n}} d\overline{S}.$ (3.120)

Deljenjem granice ćelije ${\mathcal T}$ na strane, dobijamo da je fluks kroz stranu f

$$u_f \approx -|f|(\mathbb{K}_f \mathbf{G}_f) \cdot \mathbf{n}_f - C_0 |\det(\mathcal{S}^{-1})| \int_f \left(\overline{\nabla}(\ln \overline{\rho}(\mathbf{x}))\right) \cdot \overline{\mathbf{n}} \mathrm{d}\overline{S}.$$
(3.121)

Kao i u prethodnom poglavlju, obeležimo sa $\Pr(f)$ centralnu projekciju strane f na skup $\|\overline{x}\|^2 = r^2$ iz tačke \mathbf{x}_w (slika 3.6). Komponenta toka opisana bunarskom



Slika 3.6: Radijalna projekcija na bunar.

funkcijom je usmerena ka centru bunara. Stoga je singularni deo fluksa isti kroz strane f i f_1 kao i kroz stranu $\Pr(f)$ (slika 3.6)

$$C_{0} |\det(\mathcal{S}^{-1})| \int_{f} \overline{\nabla}(\ln \overline{\rho}(\mathbf{x})) \cdot \overline{\mathbf{n}}_{f} d\overline{S}$$

= $C_{0} |\det(\mathcal{S}^{-1})| \sigma_{f} \int_{\Pr(f)} \overline{\nabla}(\ln \overline{\rho}(\Pr(\mathbf{x}))) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{f} d\overline{S},$ (3.122)

gde je $\hat{\mathbf{n}}_f$ spoljašnja normala na skup $\|\overline{\mathbf{x}}\| = r$ u tački $\Pr(\overline{\mathbf{x}}_f)$ u novom koordinatnom sistemu, dok je $\sigma_f = -1$ ako je $\overline{\mathbf{n}}_f$ usmeren unutar trougla definisanog sa \overline{f} i $\overline{\mathbf{x}}_w$, inače $\sigma_f = 1$. Primetimo da je

$$\overline{\nabla} \left(\ln \overline{\rho}(\Pr(\mathbf{x}_f)) \right) \cdot \hat{\mathbf{n}}_f = \frac{1}{r}, \qquad (3.123)$$

jer ako je $Pr(\overline{\mathbf{x}}_f) = (\overline{x}, \overline{y})$ onda

$$\overline{\nabla} \left(\ln \overline{\rho}(\Pr(\mathbf{x}_f)) \right) = \begin{bmatrix} -\frac{\overline{x}}{\overline{x}^2 + \overline{y}^2} \\ -\frac{\overline{y}}{\overline{x}^2 + \overline{y}^2} \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{n}}_f = \begin{bmatrix} -\frac{\overline{x}}{\sqrt{\overline{x}^2 + \overline{y}^2}} \\ -\frac{\overline{y}}{\sqrt{\overline{x}^2 + \overline{y}^2}} \end{bmatrix}, \quad (3.124)$$

pa kako je $\Pr(\overline{\mathbf{x}}_f)$ tačka na krugu poluprečnika r u novom koordinatnom sistemu sledi da važi jednačina (3.123). Stoga, jednačinu (3.122) možemo predstaviti kao

$$C_0 |\det(\mathcal{S}^{-1})| \int_f \overline{\nabla}(\ln \overline{\rho}(\mathbf{x})) \cdot \overline{\mathbf{n}}_f d\overline{S} = C_0 \sigma_f |\det(\mathcal{S}^{-1})| \frac{|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}}{r}, \qquad (3.125)$$

gde je $|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}$ kao i u prethodnom poglavlju dužina projekcije u novom ko
oordinatnom sistemu.

Zamenjujući (3.125) u (3.121) dobijamo aproksimaciju fluksa kroz stranu $f=\partial \mathcal{T}^+\cap \partial \mathcal{T}^-$

$$u_f \approx u_{f,+} = -|f|(\mathbb{K}_f \mathbf{G}_{f,+}) \cdot \mathbf{n}_f - C_0 \sigma_f |\det(\mathcal{S}^{-1})| \frac{|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}}{r}.$$
(3.126)

U ovakvoj aproksimaciji fluksa nepoznate vrednosti su \mathbf{G} i C_0 . Njih određujemo rešavanjem linearnog sistema koji se sastoji od tri jednačine oblika

$$\mathbf{G}_{f,+} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_+) + C_0 \ln \frac{\overline{\rho}(\mathbf{x}_i)}{\overline{\rho}(\mathbf{x}_+)} = h_i - h_+, \quad \text{gde je } \mathcal{T} \in \mathcal{M},$$
(3.127)

$$\mathbf{G}_{f,+} \cdot (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_+) + C_0 \ln \frac{\overline{\rho}(\mathbf{x}_n)}{\overline{\rho}(\mathbf{x}_+)} = g_{\mathrm{D}}(\mathbf{x}_n) - h_+, \quad \text{gde je } \mathbf{x}_n \in \Gamma_{\mathrm{D}}, \qquad (3.128)$$

$$|f_{N}|\mathbf{n}_{f_{N}}^{T}\mathbb{K}_{f_{N}}\mathbf{G}_{f,+} + C_{0}\sigma_{f_{N}}|\det(\mathcal{S}^{-1})|\frac{|\Pr(f_{N})|_{\mathcal{S}}}{r}$$

$$= -|f_{N}|g_{N}(\mathbf{x}_{f_{N}}), \quad \text{gde je } f_{N} \subseteq \Gamma_{N},$$
(3.129)

$$\mathbf{G}_{f,+} \cdot \left(\frac{\mathbb{K}_{f_{\mathrm{R}}} \mathbf{n}_{f}}{\Psi} + \mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}} - \mathbf{x}_{+} \right) + C_{0} \left(\sigma_{f_{\mathrm{R}}} |\det(\mathcal{S}^{-1})| \frac{|\mathrm{Pr}(f_{\mathrm{R}})|_{\mathcal{S}}}{r|f_{\mathrm{R}}|\Psi} + \ln \frac{\overline{\rho}(\mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}})}{\overline{\rho}(\mathbf{x}_{+})} \right)$$

$$= g_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}}) - h_{+}, \quad \text{gde je } f_{\mathrm{R}} \subseteq \Gamma_{\mathrm{R}}.$$
(3.130)

Na ovaj način dolazimo do sistema jednačina

$$A\mathbf{C} = \mathbf{b},\tag{3.131}$$

gde je

$$A = \begin{bmatrix} x_1 - x_+ & y_1 - y_+ & \ln \frac{\overline{\rho}(\mathbf{x}_1)}{\overline{\rho}(\mathbf{x}_+)} \\ x_2 - x_+ & y_2 - y_+ & \ln \frac{\overline{\rho}(\mathbf{x}_2)}{\overline{\rho}(\mathbf{x}_+)} \\ x_3 - x_+ & y_3 - y_+ & \ln \frac{\overline{\rho}(\mathbf{x}_3)}{\overline{\rho}(\mathbf{x}_+)} \end{bmatrix},$$
 (3.132)

$$\mathbf{x}_{i} = \begin{bmatrix} x_{i} & y_{i} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} \frac{\partial L}{\partial x} & \frac{\partial L}{\partial y} & C_{0} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}},$$

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} h_{1} - h_{+} & h_{2} - h_{+} & h_{3} - h_{+} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}.$$
(3.133)

Jednačine koje čine sistem treba izabrati tako da je matrica A invertibilna. Obeležimo elemente matrice A^{-1} sa a_{ij} . Neka indeks k odgovara jednačinama oblika (3.127), (3.128) ili (3.130), a neka indeks \overline{k} odgovara jednačinama oblika (3.129). Koordinate nepoznatog vektora ${\bf C}$ možemo zapisati

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \sum_{k} a_{1k} (h_k - h_+) - \sum_{\bar{k}} a_{1\bar{k}} g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}}) |f_{\bar{k}}|,
\frac{\partial L}{\partial y} = \sum_{k} a_{2k} (h_k - h_+) - \sum_{\bar{k}} a_{2\bar{k}} g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}}) |f_{\bar{k}}|,
C_0 = \sum_{k} a_{3k} (h_k - h_+) - \sum_{\bar{k}} a_{3\bar{k}} g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}}) |f_{\bar{k}}|.$$
(3.134)

Zamenjujući (3.134) u (3.126) dobijamo aproksimaciju fluksa u obliku

$$u_{f,+} = -\sum_{k} \alpha_{k}^{+} (h_{k} - h_{+}) + \sum_{\bar{k}} \alpha_{\bar{k}}^{+} g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}}) |f_{\bar{k}}|$$
(3.135)

gde je

$$\alpha_k^+ = |f|[a_{1k} \quad a_{2k}] \mathbb{K}_f \mathbf{n}_f + a_{3k} \sigma_f |\det(\mathcal{S}^{-1})| \frac{|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}}{r}, \qquad (3.136)$$

$$\alpha_{\bar{k}}^{\pm} = |f|[a_{1\bar{k}} \quad a_{2\bar{k}}]\mathbb{K}_f \mathbf{n}_f + a_{3\bar{k}}\sigma_f |\det(\mathcal{S}^{-1})| \frac{|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}}{r}.$$
(3.137)

Zahtevamo da su koeficijenti $\alpha_k, \alpha_{\bar{k}} \geq 0$ za svako k, \bar{k} . Ukoliko to nije slučaj potrebno je izabrati druge jednačine za sistem (3.131). Na isti način dobijamo i drugu jednostranu aproksimaciju

$$u_{f,-} = -\sum_{l} \alpha_{l}^{-} (h_{l} - h_{-}) + \sum_{\bar{l}} \alpha_{\bar{l}}^{-} g_{N}(\mathbf{x}_{f_{\bar{l}}}) |f_{\bar{l}}|.$$
(3.138)

Ako napravimo konveksnu kombinaciju jednostranih flukseva oblika (3.135) i (3.138) na isti način kao u nelinearnoj TPFA shemi (Odeljak 3.1.2) dobijamo aproksimaciju uz pomoć dve tačke

$$u_f \approx M_f^+ h_+ - M_f^- h_- + r_f,$$
 (3.139)

pri čemu su koeficijenti nešto drugačiji nego u Odeljku 3.1.2:

$$M_f^+ = \mu_+ \sum_k \alpha_k^+ + \mu_- \sum_{\substack{l \\ \mathbf{x}_l = \mathbf{x}_+}} \alpha_l^-, \qquad (3.140)$$

$$M_{f}^{-} = \mu_{-} \sum_{l} \alpha_{l}^{-} + \mu_{+} \sum_{\substack{k \\ \mathbf{x}_{k} = \mathbf{x}_{-}}} \alpha_{k}^{+}, \qquad (3.141)$$

$$r_{f} = \mu_{+} \sum_{\substack{\bar{k} \\ g_{N}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}}) > 0}} \alpha_{\bar{k}}^{+} g_{N}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}}) |f_{\bar{k}}| - \mu_{-} \sum_{\substack{\bar{l} \\ g_{N}(\mathbf{x}_{f_{\bar{l}}}) > 0}} \alpha_{\bar{l}}^{-} g_{N}(\mathbf{x}_{f_{\bar{l}}}) |f_{\bar{l}}|.$$
(3.142)
Koeficijenti M_f^{\pm} su nenegativni jer važi $\alpha_k, \alpha_{\bar{k}}, \alpha_l, \alpha_{\bar{l}} \ge 0$. Stoga se ovakvom diskretizacijom dobija M-matrica, pa shema dobijena na ovaj način poštuje pozitivnost rešenja.

Korekciju možemo definisati i za linearnu i za nelinearnu MPFA shemu. Zahtevamo da u aproksimaciji (3.135) učestvuje h_{-} i da u aproksimaciji (3.138) učestvuje h_{+} , pri čemu je neophodno da važi $\alpha_{\mp}^{\pm} > 0$. Tada umesto (3.59) koristimo (3.135), a umesto (3.60) koristimo (3.138). Ostatak izvođenja je identičan kao u Poglavlju 3.2. Razmatranja za nelinearnu MPFA shemu važe i za ovako izvedenu shemu, pa ona zadovoljava lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma.

Predstavljena shema se koristi u okolini bunara. Ovakva okolina može biti bilo kakvog oblika dokle god uključuje barem ćelije najbliže bunaru. Okolina jednog bunara ne sme da se preklapa sa okolinom nekog drugog bunara. Van okoline bunara se koristi nelinearna TPFA shema (Odeljak 3.1) ili MPFA shema (Poglavlje 3.2).

Dvodimenzionalna verzija NWC sheme je testirana u Primerima 6 i 7.

3.4.4 Korekcije u trodimenzionalnom slučaju

WFC korekcija (Odeljak 3.4.2) je direktno primenljiva u trodimenzionalnom slučaju, pri čemu Pr(f) označava Lambertovu cilindričnu projekciju (videti dodatak B) strane f na cilindar (zid bunara).

U trodimenzionalnom slučaju sistem (3.131) se sastoji od četiri umesto tri jednačine tipa (3.127), (3.128), (3.129) i (3.130). Fukncija $\rho(\mathbf{x})$ predstavlja udaljenost tačke \mathbf{x} od centralne ose bunara. Vektor nepoznatih je

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \frac{\partial L}{\partial x} & \frac{\partial L}{\partial y} & \frac{\partial L}{\partial z} & C_0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}.$$
 (3.143)

Njegove koordinate su

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \sum_{k} a_{1k}(h_{k} - h_{+}) - \sum_{\bar{k}} a_{1\bar{k}}g_{N}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}})|f_{\bar{k}}|,$$

$$\frac{\partial L}{\partial y} = \sum_{k} a_{2k}(h_{k} - h_{+}) - \sum_{\bar{k}} a_{2\bar{k}}g_{N}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}})|f_{\bar{k}}|,$$

$$\frac{\partial L}{\partial z} = \sum_{k} a_{3k}(h_{k} - h_{+}) - \sum_{\bar{k}} a_{3\bar{k}}g_{N}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}})|f_{\bar{k}}|,$$

$$C_{0} = \sum_{k} a_{4k}(h_{k} - h_{+}) - \sum_{\bar{k}} a_{4\bar{k}}g_{N}(\mathbf{x}_{f_{\bar{k}}})|f_{\bar{k}}|.$$
(3.144)

Prema tome jednačine (3.136) i (3.137) postaju

$$\alpha_k^+ = |f|[a_{1k} \quad a_{2k} \quad a_{3k}](\mathbb{K}_f \mathbf{n}_f) + a_{4k}\sigma_f |\det(\mathcal{S}^{-1})| \frac{|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}}{r}, \qquad (3.145)$$

$$\alpha_{\bar{k}}^{+} = |f|[a_{1\bar{k}} \quad a_{2\bar{k}} \quad a_{3\bar{k}}](\mathbb{K}_{f}\mathbf{n}_{f}) + a_{4\bar{k}}\sigma_{f}|\det(\mathcal{S}^{-1})|\frac{|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}}{r}, \qquad (3.146)$$

pri čemu je $|\Pr(f)|_{\mathcal{S}}$ površina Lambertove projekcije u novom koordinatnom sistemu. Korekcije u trodimenzionalnom slučaju testirane su u Primeru 8.

3.5 Diskretizacija Darsijevog fluksa izraženog preko pritiska

Darsijev fluks (3.9) možemo zapisati kao

$$u_f^{\mathcal{T}} = -\int_f \left(\frac{\mathbb{k}}{\mu} \nabla p\right) \cdot \mathbf{n}_f \mathrm{d}S + \int_f \left(\rho \frac{\mathbb{k}}{\mu} \mathbf{g}\right) \cdot \mathbf{n}_f \mathrm{d}S.$$
(3.147)

Neka je $f = \partial \mathcal{T}_+ \cap \mathcal{T}_-$. Drugi integral aproksimiramo kao

$$\int_{f} \left(\rho \frac{\mathbb{k}}{\mu} \mathbf{g} \right) \cdot \mathbf{n}_{f} \mathrm{d}S \approx |f| \rho_{f} \frac{(\mathbb{k}_{f} \mathbf{n}_{f}) \cdot \mathbf{g}}{\mu_{f}}$$
(3.148)

gde je $\mathbb{k}_f = \mathbb{k}(\mathbf{x}_f)$ i

$$\rho_f = \frac{\rho(\mathbf{x}_{-})|\mathcal{T}_{+}| + \rho(\mathbf{x}_{+})|\mathcal{T}_{-}|}{|\mathcal{T}_{-}| + |\mathcal{T}_{+}|}, \quad \mu_f = \frac{\mu(\mathbf{x}_{-})|\mathcal{T}_{+}| + \mu(\mathbf{x}_{+})|\mathcal{T}_{-}|}{|\mathcal{T}_{-}| + |\mathcal{T}_{+}|}.$$
(3.149)

Ukoliko primenimo sheme iz prethodnih poglavlja na prvi integral diskretni princip maksimuma, odnosno pozitivnost važiće za pritisak. Međutim, u tom slučaju potencijal ne bi bio konstantan u hidrostatičkim uslovima (kada nema toka). Diskretni princip maksimuma ne važi istovremeno i za hidraulički potencijal i za pritisak. Ukoliko želimo da diskretni princip maksimuma važi za hidraulički potencijal kada se primeni linearna TPFA shema (Odeljak 3.1.1) za aproksimaciju fluksa (3.9), potrebno je uvesti diskretizaciju fluksa kroz stranu $f = \partial \mathcal{T}_+ \cap \mathcal{T}_-$ koja se u slučaju konstantne gustine svodi na (3.10):

$$u_f \approx |f| \left\| \frac{\mathbb{k}_f \mathbf{n}_f}{\mu_f} \right\| \frac{p_+ - p_- + \rho_f g(z_+ - z_-)}{\|\mathbf{x}_- - \mathbf{x}_+\|}.$$
 (3.150)

Ovakvu aproksimaciju možemo zapisati u obliku

$$u_f = M_f^+ p_+ - M_f p_- + r_f, (3.151)$$

pri čemu je

$$M_{f}^{\pm} = |f| \left\| \frac{\mathbb{k}_{f} \mathbf{n}_{f}}{\mu_{f}} \right\| \frac{1}{\|\mathbf{x}_{-} - \mathbf{x}_{+}\|}, \quad r_{f} = |f| \left\| \frac{\mathbb{k}_{f} \mathbf{n}_{f}}{\mu_{f}} \right\| \frac{\rho_{f} g(z_{+} - z_{-})}{\|\mathbf{x}_{-} - \mathbf{x}_{+}\|}.$$
 (3.152)

Shemu koja garantuje pozitivnost hidrauličkog potencijala kada gustina nije konstantna izvodimo na sličan način kao u Odeljku 3.1.2. U okolini strane f uvedimo aproksimaciju

$$p(\mathbf{x}) + zg \frac{\rho + \rho_+}{2} \approx p_+ + z_+ g \frac{\rho + \rho_+}{2} + \mathbf{G}_{f,+} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_+).$$
 (3.153)

Zamenom ove aproksimacije u (3.9) dobijamo

$$u_f^+ \approx u_{f,+} = |f| \mathbf{x}_f^{\mathrm{T}} \frac{\mathbb{k}_f}{\mu_f} \mathbf{G}_{f,+}, \qquad (3.154)$$

pri čemu nepoznati vektor $\mathbf{G}_{f,+}$ nalazimo rešavanjem linearnog sistema koji se sastoji od tri jednačine (dve u dvodimenzionalnom slučaju) oblika:

$$\mathbf{G}_{f,+} \cdot (\mathbf{x}_{\mathcal{T}} - \mathbf{x}_{+}) = p_{\mathcal{T}} - p_{+} + (z_{\mathcal{T}} - z_{+})\rho_{\mathcal{T},+}g, \quad \text{gde je } \mathcal{T} \in \mathcal{M},$$
(3.155)

$$\mathbf{G}_{f,+} \cdot (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_+) = \overline{g}_{\mathrm{D}}(\mathbf{x}_n) - p_+ + (z_n - z_+)\rho_{n,+}g, \quad \text{gde je } \mathbf{x}_n \in \Gamma_{\mathrm{D}}, \qquad (3.156)$$

$$\mathbf{n}_{f_{\mathrm{N}}}^{\mathrm{T}} \frac{\mathbb{k}_{f_{\mathrm{N}}}}{\mu_{f_{\mathrm{N}}}} \mathbf{G}_{f,+} = -g_{\mathrm{N}}(\mathbf{x}_{f_{\mathrm{N}}}), \quad \text{gde je } \mathbf{x}_{f_{\mathrm{N}}} \in \Gamma_{\mathrm{N}},$$
(3.157)

$$\left((\mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}} - \mathbf{x}_{+})^{\mathrm{T}} + \frac{1}{\Psi} \mathbf{n}_{f_{\mathrm{R}}}^{\mathrm{T}} \frac{\mathbb{k}_{f_{\mathrm{R}}}}{\mu_{f_{\mathrm{R}}}} \right) \mathbf{G}_{f,+} =$$

$$\overline{g}_{\mathrm{R}}(\mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}}) - p_{+} + (z_{f_{\mathrm{R}}} - z_{+})\rho_{f_{\mathrm{R},+}}g, \quad \text{gde je } \mathbf{x}_{f_{\mathrm{R}}} \in \Gamma_{\mathrm{R}},$$
(3.158)

pri čemu su
$$\overline{g}_{\rm D}$$
 i $\overline{g}_{\rm R}$ funkcije kojima su zadati respektivno Dirihleov i Robinov granični uslovi za pritisak, dok je

$$\rho_{i,j} = \frac{\rho(\mathbf{x}_i) + \rho(\mathbf{x}_j)}{2}.$$
(3.159)

64

Na ovaj način dolazimo do aproksimacija

$$u_{f,+} = -\sum_{i} \alpha_{i}^{+}(p_{i}^{+} - p_{+}) + \sum_{j} \alpha_{j}^{+} g_{N}(\mathbf{x}_{j}^{+}) + \sum_{i} \alpha_{i}^{+}(z_{i} - z_{+})\rho_{i,+}g.$$
(3.160)

Istim postupkom kao u Odeljku 3.1.2 dolazimo do aproksimacije fluksa

$$u_f \approx M_f^+ p_+ - M_f^- p_- + r_f, \qquad (3.161)$$

$$M_f^{\pm} = \mu_{\pm} \sum_i \alpha_i^{\pm} + \mu_{\mp} \sum_{\substack{k \\ \mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{\pm}}} \alpha_k^{\mp}, \qquad (3.162)$$

$$r_{f} = \mu_{+} \sum_{\substack{j \\ g_{N}(\mathbf{x}_{j}^{+}) > 0}} \alpha_{j}^{+} g_{N}(\mathbf{x}_{j}^{+}) + \mu_{+} \sum_{i} (z_{i} - z_{+}) \rho_{i,+} g$$

$$-\mu_{-} \sum_{\substack{l \\ g_{N}(\mathbf{x}_{f_{l}}) > 0}} \alpha_{l}^{-} g_{N}(\mathbf{x}_{f_{l}}) - \mu_{-} \sum_{m} (z_{m} - z_{-}) \rho_{m,-} g.$$
(3.163)

Na isti način kao u Poglavlju 3.2, koristeći aproksimaciju (3.160) dolazimo do sheme koja je drugog reda tačnosti i poštuje lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma za hidraulički potencijal. Po analogiji u Poglavlju 3.3, odnosno Odeljku 3.4.3 dobijamo aproksimaciju fluksa na materijalnim diskontinuitetima, odnosno u okolini bunara, koja je drugog reda tačnosti i poštuje diskretni princip maksimuma i minimuma za hidraulički potencijal.

3.6 Nezasićeni slučaj

Razmotrimo sada stacionarnu jednačinu podzemnog strujanja u nezasićenoj sredini (2.41). Integracijom po svakoj ćeliji $\mathcal{T} \in \mathcal{M}$ dolazimo do jednačine

$$\sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} u_f^{\mathcal{T}} = \int_{\mathcal{T}} q \mathrm{d}\Omega, \qquad (3.164)$$

pri čemu je Darsijev fluks u nezasićenom slučaju

$$u_f^{\mathcal{T}} = -\int_f \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_f^{\mathcal{T}} \mathrm{d}S, \qquad (3.165)$$

gde je u Darsijeva brzina zadata jednačinom (2.34) ili (2.36).

Relativna propusnost k_r se računa iz vrednosti hidrauličkog potencijala na način opisan u Odeljku 2.7.1. Da bi se izračunao fluks potrebno je aproksimirati relativnu propusnost u strani $f = \partial \mathcal{T}^+ \cap \partial \mathcal{T}^-$. Standardni pristup je da se ova vrednost dobije na osnovu vrednosti relativne propusnosti u ćelijama \mathcal{T}^+ i \mathcal{T}^- . Ovaj pristup je predstavljen u Odeljku 3.6.1. Drugi način je da se nekako dobije vrednost hidrauličkog potencijala u strani f, pa da se potom na osnovu te vrednosti, formule (2.35) i jednog od modela iz Odeljka 2.7.1 izračuna relativna propusnost u strani f.

3.6.1 Aproksimacija relativne propusnosti

Ukoliko se za aproksimaciju fluksa koristi shema koja poštuje lokalni diskretni princip maksimuma i minimuma (ili pozitivnost) onda će biti zadovoljen lokalni diskretni princip maksimuma (pozitivnost) za hidraulički potencijal. Međutim, diskretni princip maksimuma ne mora biti zadovoljen za visinu pritiska. Kako se relativna propusnost određuje na osnovu visine pritiska, ovo može dovesti do velikih odstupanja u fluksu.

Razmotrimo aproksimaciju relativne propusnosti na jednodimenzionalnom primeru. Darsijev zakon u nezasićenom jednodimenzionalnom slučaju možemo formulisati preko visine pritiska (na osnovu (2.35)) formulom

$$u = -k_{\rm r} K \left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}z} + \gamma\right),\tag{3.166}$$

gde je K koeficijent filtracije, z prostorna promenljiva i γ kosinus ugla između ose prostorne promenljive i vektora suprotne orjentacije od usmerenja gravitacione sile. U slučaju horizontalnog toka $\gamma = 0$, dok je u slučaju vertikalnog toka $\gamma = 1$.

Darsijevu brzinu kroz tačku koja se nalazi između tačaka $z^{\rm L}$ i $z^{\rm U}=z^{\rm L}+\Delta z>z^{\rm L}$ možemo aproksimirati formulom

$$u \approx -\overline{k}_{\rm r} K \left(\frac{\Delta \psi}{\Delta z} + \gamma \right),$$
 (3.167)

pri čemu je \overline{k}_r na neki način usrednjena vrednost relativne propusnosti, dok su ψ^L i $\psi^U = \psi^L + \Delta \psi$ vrednosti visine pritiska u tačkama z^L i z^U .

Najčešće se za računanje usrednjene vrednosti relativne propusnosti $\overline{k}_{\rm r}$ koristi jedna od sledećih sredina:

• aritmetička sredina

$$k_{\rm r}^{\rm ARIT} = \frac{k_{\rm r}^{\rm L} + k_{\rm r}^{\rm U}}{2},$$
 (3.168)

• geometrijska sredina

$$k_{\rm r}^{\rm GEOM} = \sqrt{k_{\rm r}^{\rm L} k_{\rm r}^{\rm U}}, \qquad (3.169)$$

• harmonijska sredina

$$k_{\rm r}^{\rm HARM} = \frac{2}{\frac{1}{k_{\rm r}^{\rm U}} + \frac{1}{k_{\rm r}^{\rm L}}}$$
(3.170)

Svaka od ovih sredina poštuje diskretni princip maksimuma za ψ ako je mreža dovoljno fina. Nažalost, na grubim mrežama mogu se pojaviti nefizičke oscilacije [3, 4, 61], što je i pokazano u Primerima 9 i 10.

Uzimajući relativnu propusnost u gornjoj tački

$$k_{\rm r}^{\rm UPG} = k_{\rm r}^{\rm U}, \quad z^{\rm U} \ge z^{\rm L} \tag{3.171}$$

dobijamo rešenje koje poštuje diskretni princip maksimuma [4], ali je prvog reda tačnosti.

Kada je $\gamma=0$ (horizontalni tok) iz Darsijevog zakona (3.166) metodom razdvajanja promenljivih dobijamo

$$\Delta z = -\frac{K}{u} \int_{\psi^{\mathrm{L}}}^{\psi^{\mathrm{U}}} k_{\mathrm{r}} \mathrm{d}\psi. \qquad (3.172)$$

Zamenjivanjem ovog izraza u (3.167) i zahtevajući da u (3.167) važi jednakost dobijamo da je

$$\overline{k}_{\rm r} = \frac{1}{\Delta \psi} \int_{\psi^{\rm L}}^{\psi^{\rm U}} k_{\rm r}(\psi) \mathrm{d}\psi = k_{\rm r}^{\rm INT}, \qquad (3.173)$$

što znači da integralna sredina $k_{\rm r}^{\rm INT}$ daje tačan fluks u horizontalnom slučaju. Po istom principu zaključujemo da je integralna sredina dobra aproksimacija kada $|\Delta\psi/\Delta z| \gg \gamma$. Međutim, u Primeru 10 je pokazano da ako primenimo integralnu sredinu za aproksimaciju relativne propusnosti imaćemo oscilacije rešenja u nekim drugim slučajevima.

Strujanje možemo podeliti u tri kategorije:

Infiltracija je slučaj kada zasićenost raste sa visinom i tok je orjentisan na dole,
 tj. dψ/dz > 0.

- Drenaža je slučaj kada zasićenost opada sa visinom i tok je orjentisan na dole,
 tj. -γ < dψ/dz < 0.
- Kapilarno izdizanje je slučaj kada zasićenost opada sa visinom i tok je orjentisan na gore, tj. $d\psi/dz < -\gamma$.

Postoji još jedna fizička mogućnost, a to je da zasićenost raste sa visinom i da je tok orjentisan na gore. To bi značilo da je gas ispod vode i da pritisak u gasu gura vodu na gore. Da bi tok bio usmeren na gore, hidraulički potencijal u donjoj tački $z^{\rm L}$ mora da bude veći od hidrauličkog potencijala u gornjoj tački $z^{\rm U}$, tj. $h^{\rm L} > h^{\rm U}$. Na osnovu (2.35) imamo da je $z^{\rm L} + \psi^{\rm L} > z^{\rm U} + \psi^{\rm U}$, a odavde sledi da mora biti $\psi^{\rm L} > \psi^{\rm U}$ jer je $z^{\rm L} < z^{\rm U}$. Zasićenost je monotono neopadajuća funkcija u odnosu na visinu pritiska (Odeljak 2.7.1), što znači da zasićenost $s(\psi^{\rm L})$ ne može biti veća od zasićenosti $s(\psi^{\rm U})$. Prema tome ovaj slučaj se ne može opisati Ričardsovom jednačinom.

U graničnom slučaju d $\psi/dz = 0$ zasićenost se ne menja sa visinom, pa je stoga svejedno koji metod usrednjavanja koristimo. Kada je d $\psi/dz = -\gamma$ onda ne postoji tok bez obzira na vrednost $\overline{k}_{\rm r}$.

Na osnovu ove klasifikacije u [61] je predloženo usrednjavanje u zavisnosti od vrste strujanja koje zadovoljava diskretni princip maksimuma

$$k_{\mathbf{r}}^{\mathbf{S}} = \begin{cases} \max\left(k_{\mathbf{r}}^{\mathbf{INT}}, \frac{\gamma k_{\mathbf{r}}^{\mathbf{U}}}{\gamma + \Delta \psi / \Delta z}\right), & \text{kada je } \Delta \psi / \Delta z > 0, \\\\ \min\left(\frac{\gamma k_{\mathbf{r}}^{\mathbf{U}}}{\gamma + \Delta \psi / \Delta z}, k_{\mathbf{r}} \left(\psi^{\mathbf{L}} - \frac{(\Delta \psi)^{2}}{\gamma \Delta z}\right)\right), & \text{kada je } -\gamma < \Delta \psi / \Delta z < 0, \end{cases} \quad (3.174) \\\\ \frac{\Delta z k_{\mathbf{r}}^{\mathbf{R}} k_{\mathbf{r}}^{\mathbf{INT}}}{(\Delta z - \delta z) k_{\mathbf{r}}^{\mathbf{INT}} + \delta z k_{\mathbf{r}}^{\mathbf{R}}}, & \text{kada je } \Delta \psi / \Delta z < -\gamma, \end{cases}$$

pri čemu je $\psi^{\rm R}=\psi^{\rm L}-\gamma\Delta z,\,k^{\rm R}_{\rm r}=k_{\rm r}(\psi^{\rm R})$ i

$$\delta z = \frac{-\Delta \psi + \sqrt{\Delta \psi^2 + 4(k_{\rm r}^{\rm R}/k_{\rm r}^{\rm INT} - 1)\gamma(\psi^{\rm R} - \psi^{\rm U})\Delta z}}{2\gamma(k_{\rm r}^{\rm R}/k_{\rm r}^{\rm INT} - 1)}.$$
(3.175)

Ovakvom aproksimacijom relativne propusnosti za infiltraciju važi $\overline{k}_r \to k_r^{\rm U}$ kada $\Delta \psi / \Delta z \to 0$, dok za kapilarno izdizanje važi $\overline{k}_r \to k_r^{\rm U}$ kada $\Delta \psi / \Delta z \to -\gamma$. Ako pustimo da se $\psi^{\rm L}$ menja od slučaja $\Delta \psi / \Delta z = 0$ do slučaja $\Delta \psi / \Delta z = -\gamma$, funkcija $\overline{k}_r(\psi^{\rm L})$ ima istu vrednost na početku i na kraju ovog intervala a nije konstantna, što znači da nije monotona jer je neprekidna. Ovo može izazvati numeričke teškoće. Ispravka ovog usrednjavanja je

$$k_{\rm r}^{\rm NS} = \begin{cases} \max\left(k_{\rm r}^{\rm INT}, \frac{\gamma k_{\rm r}^{\rm U}}{\gamma + \Delta \psi / \Delta z}\right), & \text{kada je } \Delta \psi / \Delta z > 0, \\ \\ k_{\rm r}^{\rm U}, & \text{kada je } -\gamma < \Delta \psi / \Delta z < 0, \\ \\ \frac{\Delta z k_{\rm r}^{\rm R} k_{\rm r}^{\rm INT}}{(\Delta z - \delta z) k_{\rm r}^{\rm INT} + \delta z k_{\rm r}^{\rm R}}, & \text{kada je } \Delta \psi / \Delta z < -\gamma. \end{cases}$$
(3.176)

U [61] je pokazano da ψ poštuje diskretni princip maksimuma. Koliko je autoru poznato u trodimenzionalnom slučaju na nestrukturnim mrežama ne postoji shema koja garantuje da je diskretni princip maksimuma zadovoljen, bez obzira koji metod se koristi za računanje \overline{k}_r .

Glava 4

Diskretizacija stacionarnih jednačina transporta mase i energije

Stacionarna jednačina transporta mase sledi iz evolutivne (2.65) kada se koncentracija C ne menja sa vremenom:

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}C) - \nabla \cdot (\mathbb{D}\nabla C) = q_C. \tag{4.1}$$

Integracijom ove jednačine po svakoj od ćelija \mathcal{T} mreže \mathcal{M} i primenom Teoreme o divergenciji na advektivni i difuzni term dobija se

$$\int_{\partial \mathcal{T}} C \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S - \int_{\partial \mathcal{T}} (\mathbb{D} \nabla C) \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S = \int_{\mathcal{T}} q_C \mathrm{d}\Omega.$$
(4.2)

Kako se $\partial \mathcal{T}$ sastoji od konačnog broja strana, integral difuznog terma se može prikazati u obliku

$$\int_{\partial \mathcal{T}} (\mathbb{D}\nabla C) \cdot \mathbf{n} dS = \sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} \int_{f} (\mathbb{D}\nabla C) \cdot \mathbf{n}_{f} dS.$$
(4.3)

Diskretizacija difuznog terma jednačine transporta se izvodi na isti način kao i diskretizacija prostornog terma u jednačini podzemnog strujanja (Glava 3).

Integral advektivnog terma može se prikazati kao

$$\int_{\partial \mathcal{T}} C \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S = \sum_{f \in \mathcal{T}} \int_{f} C \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S \approx \sum_{f \in \mathcal{T}} u_{f} C_{f}, \qquad (4.4)$$

70

gde je u_f Darsijev fluks dat jednačinom (3.8). Njegove vrednosti su izračunate iz jednačine podzemnog strujanja ili su poznate kada je strujna slika unapred zadata. Sa C_f je označena vrednost koncentracije u strani f. S obzirom da su vrednosti koncentracije vezane za tačke kolokacije (težišta ćelija), vrednost koncentracije u strani f je potrebno izraziti preko diskretnih vrednosti koncentracije u ćelijama. Diskretizacija advektivnog terma je predstavljena u Poglavljima 4.1 i 4.2.

Stacionarnu jednačinu transporta toplotne energije dobijamo iz jednačine (2.84) kada se temperatura ne menja sa vremenom

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}\rho c_{\mathbf{w}}T) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = q_T. \tag{4.5}$$

Diskretizacija konduktivnog terma u jednačini transporta toplotne energije izvodi se na isti način kao u Glavi 3. Advektivni term jednačine transporta energije diskretizuje se na isti način kao i advektivni term u jednačini transporta mase.

4.1 Linearna diskretizacija advektivnog terma

Najlogičnije izgleda da se koncentracija u strani $f = \partial \mathcal{T}^+ \cap \partial \mathcal{T}^-$ predstavi kao aritmetička sredina koncentracije u ćelijama \mathcal{T}^+ i \mathcal{T}^- :

$$C_f \approx \frac{1}{2}(C_+ + C_-).$$
 (4.6)

Ovo zovemo centralna shema. Ovakva aproksimacija razvija oscilacije kada advekcija dominira u odnosu na difuziju i disperziju [59]. Razlog je taj što centralna diskretizacija advektivnog fluksa $u_f C_f$ dodaje $1/2u_f$ na glavnu dijagonalu matrice sistema na pozicijama $(\mathcal{T}^+, \mathcal{T}^+), (\mathcal{T}^-, \mathcal{T}^-)$, kao i van glavne dijagonale na pozicijama $(\mathcal{T}^-, \mathcal{T}^+), (\mathcal{T}^+, \mathcal{T}^-)$. Da bi se dobila M-matrica elementi glavne dijagonale moraju biti pozitivni, a svi ostali nenegativni. Kako to ovde ne mora da bude slučaj, ovakva diskretizacija ne poštuje diskretni princip maksimuma (Teorema 2).

Upravo zahtev da matrica sistema bude M-matrica dovodi nas do uzvodne sheme¹. Neka je normala \mathbf{n}_f usmerena od ćelije \mathcal{T}^+ ka ćeliji \mathcal{T}^- . Koncentraciju

¹U literaturi na engleskom jeziku *upwind scheme*

u strani aproksimiramo kao

$$C_f \approx \begin{cases} C_+ & \text{ako je } u_f \ge 0, \\ C_- & \text{ako je } u_f < 0. \end{cases}$$
(4.7)

Ovakvom diskretizacijom dolazimo do dijagonalno dominantne M-matrice, jer ako je u_f pozitivno onda se na glavnu dijagonalu dodaje pozitivna vrednost u_f , a u suprotnom se van glavne dijagonale dodaje negativna vrednost u_f . Stoga na osnovu Teoreme 2 ovako definisana shema zadovoljava diskretni princip maksimuma (v. Primer 13).

Advektivni fluks diskretizovan uzvodnom shemom (4.7) moguće je zapisati u obliku

$$u_f C_f \approx u_f \frac{1}{2} (C_+ + C_-) + |u_f| \frac{1}{2} (C_+ - C_-),$$
 (4.8)

odnosno kao zbir centralne sheme (4.6) i terma $|u_f|\frac{1}{2}(C_+ - C_-)$. Ovaj term odgovara linearnoj diskretizaciji difuznog terma (3.11) sa koeficijentima $1/2|u_f|$. Stoga ga nazivamo veštačka difuzija. Dakle, cena zadovoljenja diskretnog principa maksimuma je da uzvodna shema daje rešenje koje odgovara situaciji sa intenzivnijom difuzijom nego što je zadata.

Kada advekcija značajno dominira nad difuzijom (npr. u aerodinamici), veštačka difuzija može da bude mnogo snažnija od fižičke difuzije i disperzije. U takvoj situaciji ne treba koristiti uzvodnu shemu. Kod simuliranja podzemnog strujanja uzvodna shema može dati zadovoljavajuće rezultate u nekim slučajevima.

Tačniju diskretizaciju advektivnog terma dobijamo popravkom uzvodne sheme

$$C_{f} \approx \begin{cases} C_{+} + \mathbf{g}_{+} \cdot (\mathbf{x}_{f} - \mathbf{x}_{+}) & \text{ako je } u_{f} > 0, \\ C_{-} + \mathbf{g}_{-} \cdot (\mathbf{x}_{f} - \mathbf{x}_{-}) & \text{ako je } u_{f} < 0. \end{cases}$$
(4.9)

Nepoznati gradijent \mathbf{g}_+ nalazimo rešavanjem sistema linearnih jednačina, koji je sastavljen tako da svakoj strani $\tilde{f} \subset \partial \mathcal{T}^+$ odgovara jedna od jednačina

$$\mathbf{g}_{+}(\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{+}) = C_{i} - C_{+}$$
 kada je $\tilde{f} = \partial \mathcal{T}^{+} \cap \partial \mathcal{T}^{i}$, (4.10)

$$\mathbf{g}_{+}(\mathbf{x}_{\tilde{f}} - \mathbf{x}_{+}) = g_{\mathrm{D}}^{C}(\mathbf{x}_{\tilde{f}}) - C_{+} \quad \text{kada je } \tilde{f} \subseteq \Gamma_{\mathrm{D}}^{C},$$
(4.11)

$$\mathbf{n}_{\tilde{f}}^{\mathrm{T}} \mathbb{D} \mathbf{g}_{+} = -g_{\mathrm{N}}^{C}(\mathbf{x}_{\tilde{f}}) \quad \text{kada je } \tilde{f} \subseteq \Gamma_{\mathrm{N}}^{C},$$
(4.12)

72

$$\left(\left(\mathbf{x}_{\tilde{f}} - \mathbf{x}_{+}\right)^{\mathrm{T}} + \frac{1}{\Psi^{C}}\mathbf{n}_{\tilde{f}}^{\mathrm{T}}\mathbb{D}\right)\mathbf{g}_{+} = g_{\mathrm{R}}^{C}(\mathbf{x}_{\tilde{f}}) - C_{+} \quad \text{kada je } \tilde{f} \subseteq \Gamma_{\mathrm{R}}^{C}, \tag{4.13}$$

gde je C_i koncentracija u ćeliji \mathcal{T}^i . Na isti način pronalazimo i nepoznati gradijent \mathbf{g}_{-} .

Na ovaj način dobijen je preodređen sistem linearnih jednačina koji rešavamo metodom najmanjih kvadrata.

Shema dobijena na ovaj način je drugog reda tačnosti (v. Primer 12), ali razvija oscilacije u regionima gde se gradijent koncentracije brzo menja (odnosno krši princip maksimuma i minimuma v. Primer 13).

4.2 Nelinearna diskretizacija advektivnog terma

Godunov je u [37] dokazao da su linearne neoscilatorne sheme najviše prvog reda tačnosti². Prema tome neophodno je da shema bude nelinearna da bi poštovala diskretni princip maksimuma i bila drugog reda tačnosti.

Jedan od načina da rešenje poštuje diskretni princip maksimuma je ograničavanje fluksa³. Koncentraciju u strani $f = \partial \mathcal{T}^+ \cap \partial \mathcal{T}^-$ aproksimiramo kao

$$C_{f} \approx \begin{cases} C_{+} + \phi_{+} \mathbf{g}_{+} \cdot (\mathbf{x}_{f} - \mathbf{x}_{+}) & \text{ako je } u_{f} > 0, \\ C_{-} + \phi_{-} \mathbf{g}_{-} \cdot (\mathbf{x}_{f} - \mathbf{x}_{-}) & \text{ako je } u_{f} < 0, \end{cases}$$
(4.14)

gde su ϕ_\pm limiteri fluksa, koji treba da zadovoljavaju

$$\min_{\substack{j\\\partial\mathcal{T}^{\pm}\cap\mathcal{T}^{j}\neq\emptyset}} (C_{j}, C_{\pm}) \leq C_{\pm} + \phi_{\pm} \mathbf{g}_{\pm} \cdot (\mathbf{x}_{f} - \mathbf{x}_{\pm}) \leq \max_{\substack{j\\\partial\mathcal{T}^{\pm}\cap\mathcal{T}^{j}\neq\emptyset}} (C_{j}, C_{\pm}).$$
(4.15)

Neka je

$$\Theta_{\pm,f} = \mathbf{g}_{\pm} \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_{\pm}). \tag{4.16}$$

 $^{^{2}}$ Ovo tvrđenje se u literaturi na engleskom jeziku često naziva order barrier theorem 3 U literaturi na engleskom jeziku flux limiting

Limiter Barta i Džaspersena ϕ se u [5] izračunava kao

$$\phi_{\pm,f} = \begin{cases} \min\left(1, \frac{\max_j(C_j, C_{\pm}) - C_{\pm}}{\Theta_{\pm,f}}\right) & \text{ako je } \Theta_{\pm,f} > 0, \\ \min\left(1, \frac{\min_j(C_j, C_{\pm}) - C_{\pm}}{\Theta_{\pm,f}}\right) & \text{ako je } \Theta_{\pm,f} < 0, \\ 1 & \text{ako je } \Theta_{\pm,f} = 0, \end{cases}$$
(4.17)

dok za jedinstveni limiter po ćeliji uzimamo

$$\phi_{\pm} = \min_{f} (\phi_{\pm,f}). \tag{4.18}$$

U regionima gde se gradijent koncentracije brzo menja ili u kojima postoji lokalni ekstremum, vrednost limitera je bliska nuli. Sa druge strane u ostalim regionima vrednost limitera je bliska jedinici. Na ovaj način limiterom se prebacujemo na shemu prvog reda kada je shema drugog reda oscilatorna.

Limiter Barta i Džaspersena ponekad sprečava konvergenciju do pravog stacionarnog stanja. Alternativa je limiter Venkatakrišnana predstavljen u radu [63], gde je i pokazano da ovakav limiter može poboljšati konvergenciju ali po ceni narušavanja diskretnog principa maksimuma.

Istorijska modifikacija [19] rešava problem konvergencije tako što se posle određenog broja nelinearnih iteracija limiter izračunava kao minimum limitera iz prethodne iteracije i onoga što bi trebalo da se dobije u toj iteraciji. Istorijskom modifikacijom izbegavaju se problemi u konvergenciji ali po ceni izvesnog smanjenja tačnosti.

Glava 5

Rešavanje sistema nelinearnih jednačina

Kada strujna slika nije unapred poznata onda je potrebno rešiti diskretizovane jednačine podzemnog strujanja i transporta. Ove jednačine čine nelinearni sistem, jer su jednačine transporta nelinearne. Dodatnu nelinearnost unosi relativna propusnost ako je podzemna sredina nezasićena, kao i sam numerički postupak ako je fluks aproksimiran nelinearnom shemom.

Koncentracija i temperatura zavise od pritiska (tj. od hidrauličkog potencijala) koji treba izračunati. Sa druge strane, pritisak preko gustine zavisi od koncentracije i temperature (jednačina 2.42). Dakle, potrebno je istovremeno izračunati koncentraciju, temperaturu i pritisak. Postoje dve osnovne klase metoda kojima se rešava jedan ovakav spregnut sistem jednačina:

Kod razdvojenih metoda jednačine se rešavaju naizmenično. Prvo se rešava diskretizovana jednačina podzemnog strujanja i zatim se koristi dobijeni Darsijev fluks da se formiraju diskretizovane jednačine transporta. Potom se rešavaju ove jednačine i iz dobijene koncentracije i temperature izračunava se gustina koja se koristi u jednačini podzemnog strujanja u sledećoj iteraciji. Ovakav pristup je moguće koristiti kada je međusobna zavisnost jednačina slaba tj. kada se gustina ne menja mnogo sa koncentracijom i temperaturom. U suprotnom bi bilo neophodno koristiti veoma mali vremenski korak. Ova pretpostavka obično važi u slučaju podzemne vode imajući u vidu tipične varijacije koncentracije i temperature. Uostalom, ova pretpostavka je neophodna da bi Busineskova aproksimacija bila validna.

 Kod spregnutih metoda od diskretizovanih jednačina podzemnog strujanja i transporta formira se jedan veliki sistem algebarskih jednačina koji se zatim linearizuje i rešava odjednom. Spregnute metode su jedina opcija kada je sprega između jednačina snažna.

Bez obzira da li koristimo razdvojene ili spregnute metode, potrebno je rešiti sisteme nelinearnih jednačina.

5.1 Pikarov metod

Sistem nelinearnih jednačina

$$A(\mathbf{X})\mathbf{X} = \mathbf{b}(\mathbf{X}),\tag{5.1}$$

pri čemu je \mathbf{X} vektor nepoznatih fizičkih veličina (hidraulički potencijal, koncentracija, temperatura) u tačkama kolokacije, linearizujemo Pikarovim metodom (metodom fiksne tačke)

$$A(\mathbf{X}^m)\mathbf{X}^{m+1} = \mathbf{b}(\mathbf{X}^m),\tag{5.2}$$

pri čemu za početnu iteraciju m = 0 u evolutivnim jednačinama uzimamo rešenje iz prethodnog vremenskog trenutka. Iterativni postupak nastavljamo dokle god dobijeno rešenje ne zadovolji nejednakost

$$\frac{\|A(\mathbf{X}^m)\mathbf{X}^m - \mathbf{b}(\mathbf{X}^m)\|}{\|\mathbf{X}^m\|} < \epsilon,$$
(5.3)

pri čemu je ϵ zahtevana tačnost.

Pikarov metod se može koristiti i kao razdvojeni i kao spregnuti metod.

5.2 Njutnov metod

Zapišimo sistem nelinearnih jednačina u obliku

$$F(\mathbf{X}) = 0. \tag{5.4}$$

Krenuvši od rešenja iz prethodnog vremenskog trenutka, Njutnovom metodom se naredne iteracije izračunavaju formulom

$$\mathbf{X}^{m+1} = \mathbf{X}^m - \left(\nabla F(\mathbf{X}^m)\right)^{-1} F(\mathbf{X}^m), \tag{5.5}$$

pri čemu je ∇F Jakobijan vektorske funkcije F. Parcijalni izvodi u Jakobijanu se aproksimiraju konačnim razlikama.

Njutnov metod konvergira ako je početno rešenje dovoljno blisko tačnom. Kako bi se omogućila konvergencija i kada to nije slučaj, umesto (5.5) za dobijanje naredne iteracije koristi se

$$\mathbf{X}^{m+1} = \mathbf{X}^m - \alpha^m \left(\nabla F(\mathbf{X}^m)\right)^{-1} F(\mathbf{X}^m), \tag{5.6}$$

pri čemu se α^m bira algoritmom linijske pretrage¹ tako da zadovoljava

$$||F(\mathbf{X}^{m+1})|| \le (1 - \beta \alpha^m) ||F(\mathbf{X}^m)||,$$
 (5.7)

pri čemu se 0 < β < 1 fiksira. Za početak se uzima $\alpha^m = 1$, pa se potom prepolovljuje ako prethodna nejednakost nije zadovoljena. Takav postupak ponavljamo sve dok (5.7) ne bude zadovoljeno ili dok α^m ne postane suviše malo. Tako, ustvari, dobijamo ograničenje 0 < $\alpha^m \leq 1$ koje garantuje da je 0 < 1 – $\beta \alpha^m < 1$.

Kada bismo sistem (5.6) mogli tačno da rešimo, nejednakost (5.7) bi garantovano bila zadovoljena za dovoljno malo α^m . Međutim, ako je vremenski korak suviše velik, može se dogoditi da Jakobijan $\nabla F(\mathbf{X}^m)$ bude slabo uslovljena matrica. Smanjivanjem vremenskog koraka uvek se može dobiti dovoljno dobra matrica tako da Njutnova metod (i obična i sa linijskom pretragom) konvergira. Takođe, isti ovi zaključi važe i za Pikarovu metodu: što je vremenski korak manji, matrica $A(\mathbf{X}^m)$ sistema (5.2) je bolje uslovljena i konvergencija je bolja.

¹Na engleskom jeziku *line search algorithm*

Matrica $\nabla F(\mathbf{X}^m)$ u opštem slučaju ne mora da bude invertibilna, te može da se desi da ne možemo naći sledeću iteraciju Njutnovim metodom. Kada je $\nabla F(\mathbf{X}^m)$ invertibilna, ona nije obavezno i dijagonalno dominantna M-matrica, pa prema tome rešenje dobijeno u Njutnovoj iteracija ne mora da zadovoljava diskretni princip maksimuma. Ukoliko Njutnov metod iskonvergira dobijeno rešenje je isto kao i rešenje dobijeno sa Pikarovim metodom do na traženu tačnost, te stoga zadovoljava diskretni princip maksimuma ako ga poštuje i shema za diskretizaciju.

Obično Njutnov metod sa linijskom pretragom dozvoljava veće vremenske korake od Pikarove metode.

Kvadratna konvergencija Njutnovog metoda se gubi ukoliko se on koristi kao razdvojen metod, te je stoga opravdano potrošiti dodato vreme na izračunavanje Jakobijana jedino ako se Njutnov metod primenjuje na spregnut sistem jednačina.

Glava 6

Diskretizacija evolutivnih jednačina

Posmatrajmo za početak evolutivnu jednačinu podzemnog strujanja u zasićenoj sredini (2.26). Integracijom po svim ćelijama mreže \mathcal{M} i primenom Teoreme o divergenciji na difuzni term dobijamo

$$S_{\rm s} \int_{\mathcal{T}} \frac{\partial h}{\partial t} \mathrm{d}\Omega - \int_{\partial \mathcal{T}} (\mathbb{K} \nabla h) \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S = \int_{\mathcal{T}} q \mathrm{d}\Omega, \quad \mathcal{T} \in \mathcal{M}, \tag{6.1}$$

pod pretpostavkom da je specifična izdašnost izdani pod pritiskom S_s konstantna u ćeliji \mathcal{T} . Integracija prethodne jednačine po vremenskoj promenljivoj od t^n do t^{n+1} $((t^n, t^{n+1}] \subseteq (0, \mathfrak{T}])$ daje

$$S_{s} \int_{t^{n}}^{t^{n+1}} \int_{\mathcal{T}} \frac{\partial h}{\partial t} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t - \int_{t^{n}}^{t^{n+1}} \int_{\partial \mathcal{T}} (\mathbb{K}\nabla h) \cdot \mathbf{n} \mathrm{d}S \mathrm{d}t = \int_{t^{n}}^{t^{n+1}} \int_{\mathcal{T}} q \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t, \quad \mathcal{T} \in \mathcal{M}.$$
(6.2)

Prema Fubinijevoj teoremi možemo promeniti redosled integracije u prvom termu, pa primenom Njutn-Lajbnicove formule dobijamo

$$S_{\mathbf{s}}|\mathcal{T}|\left(h_{\mathcal{T}}^{n+1}-h_{\mathcal{T}}^{n}\right)+\int_{t^{n}}^{t^{n+1}}\sum_{f\subset\partial\mathcal{T}}u_{f}\mathrm{d}t=|\mathcal{T}|\int_{t^{n}}^{t^{n+1}}q_{\mathcal{T}}\mathrm{d}t,\quad\mathcal{T}\in\mathcal{M},$$
(6.3)

pri čemu gornji indeks predstavlja vremenski korak, fluksevi u_f dati su jednačinom (3.5), dok je

$$q_{\mathcal{T}} = q(\mathbf{x}_{\mathcal{T}}). \tag{6.4}$$

Da bi ova jednačina bila potpuno diskretizovana potrebno je aproksimirati vremenske integrale i aproksimirati flukseve u_f na neki od načina opisanih u Glavi 3. Najjednostavnije bi bilo koristiti eksplicitnu shemu koja podrazumeva da se vremenski integrali aproksimiraju pomoću vrednosti u *n*-tom vremenskom trenutku

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} u_f \mathrm{d}t \approx \Delta t^n u_f^n, \quad \Delta t^n = t^{n+1} - t^n, \tag{6.5}$$

pri čemu su fluksevi u_f^n aproksimirani preko poznatih hidrauličkih potencijala u vremenskom trenutku t^n (Glava 3). Aproksimacijom

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} q_{\mathcal{T}} \mathrm{d}t \approx \Delta t^n q_{\mathcal{T}}^n, \quad q_{\mathcal{T}}^n = q(\mathbf{x}_{\mathcal{T}}, t^n)$$
(6.6)

dobijamo eksplicitnu diskretizaciju jednačine (6.3)

$$S_{\rm s}|\mathcal{T}|\left(h_{\mathcal{T}}^{n+1}-h_{\mathcal{T}}^{n}\right)+\Delta t^{n}\sum_{f\subset\partial\mathcal{T}}u_{f}^{n}=|\mathcal{T}|\Delta t^{n}q_{\mathcal{T}}^{n},\quad\mathcal{T}\in\mathcal{M}$$
(6.7)

i sada se odavde eksplicitno dobija $h_{\mathcal{T}}^{n+1}$. Međutim, ovakav pristup zahteva da je ispunjen CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) uslov da bi rešenje bilo stabilno [16]. Ovaj uslov zahteva da je vremenski korak proporcionalan kvadratu najmanjeg rastojanja izmedju težista dve ćelija mreže \mathcal{M}

$$\Delta t \le C_0 l^2, \quad l = \inf_{i,j \in \mathcal{M}} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$$
(6.8)

gde je C_0 konstanta. Ovo je strogo ograničenje na veličinu vremenskog koraka, te je stoga ovakav pristup često neupotrebljiv u praksi jer bi proračun predugo trajao.

Drugi način je da za aproksimaciju vremenskih integrala koristimo

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} u_f \mathrm{d}t \approx \Delta t^n u_f^{n+1}, \quad \int_{t^n}^{t^{n+1}} q_{\mathcal{T}} \mathrm{d}t \approx \Delta t^n q_{\mathcal{T}}^{n+1}.$$
(6.9)

Ovako dolazimo do implicitne diskretizacije

$$S_{\rm s}|\mathcal{T}|\left(h_{\mathcal{T}}^{n+1}-h_{\mathcal{T}}^{n}\right)+\Delta t^{n}\sum_{f\subset\partial\mathcal{T}}u_{f}^{n+1}=|\mathcal{T}|\Delta t^{n}q_{\mathcal{T}}^{n+1},\quad\mathcal{T}\in\mathcal{M}.$$
(6.10)

Prednost implicitnog metoda je da je on stabilan za proizvoljno veliki vremenski korak. Za integraciju u vremenu moguće je koristiti čitav niz metoda za diskretizaciju sistema običnih diferencijalnih jednačina (Runge-Kuta, Adams, itd.) koje dopuštaju različite veličine vremenskog koraka.

Na osnovu hidrauličkog potencijala u trenutku t^n , rešavanjem sistema linearnih jednačina (6.10) dolazimo do hidrauličkog potencijala u trenutku t^{n+1} . Raspored hidrauličkog potencijala u trenutku t^0 je poznat iz početnog uslova (2.50). Na isti način dolazimo i do implicitne diskretizacije jednačine podzemnog strujanja u nezasićenoj sredini (2.38)

$$|\mathcal{T}|\left(\theta_{\mathcal{T}}^{n+1} - \theta_{\mathcal{T}}^{n}\right) + \Delta t^{n} \sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} u_{f}^{n+1} = |\mathcal{T}| \Delta t^{n} q_{\mathcal{T}}^{n+1}.$$
(6.11)

U nezasićenom slučaju fluksevi u_f^{n+1} se diskretizuju na osnovu Poglavlja (3.6). Kako relativna propusnost zavisi od hidrauličkog potencijala na nelinearan način, diskretizacija evolutivne jednačine (6.11) je nelinearna. Stoga ga je potrebno na neki način linearizovati, što je predstavljeno u Poglavljima 6.1 i 6.2.

Istim postupkom dobija se i diskretizovana evolutivna jednačina transporta mase (2.65)

$$\begin{aligned} |\mathcal{T}| \left(\theta_{\mathcal{T}}^{n+1} C_{\mathcal{T}}^{n+1} - \theta_{\mathcal{T}}^{n} C_{\mathcal{T}}^{n} \right) + \Delta t^{n} \sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} u_{f}^{n+1} C_{f}^{n+1} \\ + \Delta t^{n} \sum_{f \subset \partial \mathcal{T}} v_{f}^{n+1} = |\mathcal{T}| \Delta t^{n} q_{\mathcal{T}}^{n+1}, \quad \mathcal{T} \in \mathcal{M}. \end{aligned}$$

$$(6.12)$$

pri čemu je

$$q_{\mathcal{T}}^{n+1} = q_C(\mathbf{x}_{\mathcal{T}}, t^{n+1}).$$
(6.13)

Diskretizacija jednačine transporta energije izvodi se na isti način kao i diskretizacija jednačine transporta mase.

Ukoliko su u modelu prisutne sorpcija i degradacija onda je potrebno istovremeno rešavati diskretizovanu jednačinu transporta mase kroz vodu (2.73)

$$\begin{aligned} |\mathcal{T}| \left(\theta_{\mathcal{T}}^{n+1} C_{\mathcal{T}}^{n+1} - \theta_{\mathcal{T}}^{n} C_{\mathcal{T}}^{n} \right) + \Delta t^{n} \sum_{f \in \mathcal{T}} u_{f}^{n+1} C_{f}^{n+1} + \Delta t^{n} \sum_{f \in \mathcal{T}} v_{f}^{n+1} \\ + \Delta t^{n} (1 - \varepsilon) a (C_{\mathcal{T}}^{n+1} - b \bar{C}_{\mathcal{T}}^{n+1}) + \frac{\ln 2}{t_{1/2}} \theta_{\mathcal{T}}^{n+1} C_{\mathcal{T}}^{n+1} = |\mathcal{T}| \Delta t^{n} q_{\mathcal{T}}^{n+1}, \end{aligned}$$
(6.14)

kao i diskretizovanu jednačinu koja opisuje koncentraciju u čvrstoj fazi (2.74)

$$C_{\mathcal{T}}^{n+1} - C_{\mathcal{T}}^{n} - \Delta t^{n} a (C_{\mathcal{T}}^{n+1} - b \bar{C}_{\mathcal{T}}^{n+1}) + \Delta t^{n} \frac{\ln 2}{\bar{t}_{1/2}} \bar{C}_{\mathcal{T}}^{n+1} = 0.$$
(6.15)

Uticaj sorpcije i degradacije na koncentraciju rastvorene materije razmatran je u Primeru 14.

6.1 Pikarov metod

Fluksevi u_f^{n+1} u jednačini (6.11) su na osnovu Glave 3 predstavljeni kao kombinacija hidrauličkih potencijala na vremenskom nivou n+1 plus eventualno slobodni član, pa njihovu sumu možemo predstaviti kao

$$\sum_{f} u_{f}^{n+1} = \sum_{j} \zeta_{\mathcal{T},j}^{n+1} h_{j}^{n+1} + \overline{r}_{i}.$$
(6.16)

Stoga, jednačinu (6.11) možemo zapisati kao

$$|\mathcal{T}|\left(\theta_{\mathcal{T}}^{n+1} - \theta_{\mathcal{T}}^{n}\right) + \Delta t^{n}\left(\sum_{j}\zeta_{\mathcal{T},j}^{n+1}h_{j}^{n+1} + \overline{r}_{\mathcal{T}}\right) = |\mathcal{T}|\Delta t^{n}q_{\mathcal{T}}^{n+1}, \quad \mathcal{T} \in \mathcal{M}, \quad (6.17)$$

gde su $\zeta_{\mathcal{T},j}^{n+1}$ neki koeficijenti.

Grešku

$$\epsilon_{\text{bal}}^{\mathcal{T}} = |\mathcal{T}| \left(\theta_{\mathcal{T}}^{n+1} - \theta_{\mathcal{T}}^{n} \right) + \Delta t^{n} \left(\sum_{j} \zeta_{\mathcal{T},j}^{n+1} h_{j}^{n+1} + \overline{r}_{\mathcal{T}} \right) - |\mathcal{T}| \Delta t^{n} q_{\mathcal{T}}^{n+1} \tag{6.18}$$

nazivamo greškom u balansu u ćeliji \mathcal{T} . Sabiranjem grešaka u balansu po svim ćelijama dobijamo grešku u balansu celog modela u vremenu od (t^n, t^{n+1}) .

Pikarovim metodom ne možemo direktno rešiti sistem jer θ_i^{n+1} zavisi od nepoznatog rešenja na nelinearan način. Stoga, uvodimo aproksimaciju

$$\theta_{\mathcal{T}}^{n+1} - \theta_{\mathcal{T}}^n \approx \mathcal{C}(h^n) \left(h_i^{n+1} - h_i^n \right).$$
(6.19)

pri čemu se specifični kapacitet vlage $C(h) = \partial \theta / \partial h$ izračunava iz jednačina (2.32), (2.44) i jedne od jednačina (2.46) ili (2.48).

Zamenom (6.19) u jednačini (6.17) dobijamo

$$|\mathcal{T}|\mathcal{C}(h^n)\left(h_{\mathcal{T}}^{n+1} - h_{\mathcal{T}}^n\right) + \Delta t^n \left(\sum_j \zeta_{\mathcal{T},j}^{n+1} h_j^{n+1} + \overline{r}_{\mathcal{T}}\right) = |\mathcal{T}|\Delta t^n q_{\mathcal{T}}^{n+1}.$$
 (6.20)

Sistem ovakvih jednačina je moguće rešiti Pikarovim metodom na način opisan u Poglavlju 5.1. Primetimo da ovakvom diskretizacijom ustvari rešavamo jednačinu podzemnog strujanja u obliku zavisnom samo od hidrauličkog potencijala (2.40).

Međutim, greška koju uvodi aproksimacija (6.19) može biti vrlo velika. Ovo je naročito izraženo kada zasićeni front nadire u suvu sredinu (v. Primer 15), zato što tu postoji skok u količini vode i velika je razlika da li će se $\partial \theta / \partial h$ računati u h^{n+1} , h^n ili negde između. Jedan od načina da se ovaj problem prevaziđe je modifikovan Pikarov metod (Celia metod) [13] koji je prikazana u nastavku.

6.2 Modifikovani Pikarov metod

Predstavimo hidraulički potencijal kao korigovanu vrednost iz prethodne nelinearne iteracije

$$h_{\mathcal{T}}^{n+1,m+1} = h_i^{n+1,m} + \delta_{\mathcal{T}}.$$
 (6.21)

Promenu količine vode na osnovu aproksimacije (6.19) možemo predstaviti kao

$$\theta_{\mathcal{T}}^{n+1,m+1} - \theta_{\mathcal{T}}^{n} = \theta_{\mathcal{T}}^{n+1,m+1} - \theta_{\mathcal{T}}^{n+1,m} + \theta_{\mathcal{T}}^{n+1,m} - \theta_{\mathcal{T}}^{n}$$

$$\approx \mathcal{C}(h^{n+1,m})\delta_{\mathcal{T}} + \theta_{\mathcal{T}}^{n+1,m} - \theta_{\mathcal{T}}^{n}.$$
(6.22)

Zamenom prethodne jednačine i jednačine (6.21) u (6.17) dobijamo modifikovanu Pikarovu metodu

$$\begin{aligned} |\mathcal{T}|\mathcal{C}(h^{n+1,m})\delta_{\mathcal{T}} + \Delta t^n \sum_j \zeta_{\mathcal{T},j}^{n+1,m} \delta_j &= \\ -\Delta t^n \left(\sum_j \zeta_{\mathcal{T},j}^{n+1,m} h_j^{n+1,m} + \bar{r}_{\mathcal{T}} \right) - |\mathcal{T}| \left(\theta_{\mathcal{T}}^{n+1,m} - \theta_{\mathcal{T}}^n \right) + |\mathcal{T}| \Delta t^n q_{\mathcal{T}}^{n+1}. \end{aligned}$$

$$(6.23)$$

Nepoznate u ovom sistemu su korekcije δ_{τ} , na osnovu kojih se iz jednačine (6.21) dobija novi potencijal. Ovaj postupak se ponavlja dok ne bude uspunjen uslov (5.3).

Prednost ovakvog metoda u odnosu na standardni Pikarov metod je što kada iterativni proces konvergira korekcija teži nuli, pa cela leva strana jednačine (6.23) iščezava. Na ovaj način nestaje greška koju unosimo računanjem C(h). Kada leva strana iščezne dobijeno rešenje je ujedno i rešenje sistema (6.17).

Ukoliko nelinearni sistem (6.17) rešavamo Njutnovom metodom situacija je ista kao sa modifikovanim Pikarovim metodom, tj. nemamo problem zbog aproksimacije C(h), jer direktno rešavamo sistem (6.17).

Glava 7

Numerički primeri

Za ocenu grešaka u primerima korišćene su L_2 i L_∞ norme:

$$\epsilon_2^h = \left[\frac{\sum_{\mathcal{T} \in \mathcal{M}} (h(\mathbf{x}_{\mathcal{T}}) - h_{\mathcal{T}})^2 |\mathcal{T}|}{\sum_{\mathcal{T} \in \mathcal{M}} (h(\mathbf{x}_{\mathcal{T}}))^2 |\mathcal{T}|} \right]^{1/2},$$
(7.1)

$$\epsilon_{\max}^{h} = \frac{\max_{\mathcal{T}\in\mathcal{M}} |h(\mathbf{x}_{\mathcal{T}}) - h_{\mathcal{T}}|}{\left[\sum_{\mathcal{T}\in\mathcal{M}} (h(\mathbf{x}_{\mathcal{T}}))^{2} |\mathcal{T}| / \sum_{\mathcal{T}\in\mathcal{M}} |\mathcal{T}|\right]^{1/2}},$$
(7.2)

$$\epsilon_2^{\mathbf{u}} = \left[\frac{\sum_f (\mathbf{u}(\mathbf{x}_f) \cdot \mathbf{n}_f - u_f^h)^2 |f|}{\sum_f (\mathbf{u}(\mathbf{x}_f) \cdot \mathbf{n}_f)^2 |f|}\right]^{1/2}$$
(7.3)

$$\epsilon_{\max}^{\mathbf{u}} = \frac{\max_{f} |\mathbf{u}(\mathbf{x}_{f}) \cdot \mathbf{n}_{f} - u_{f}^{h}|}{\left[\sum_{f} (\mathbf{u}(\mathbf{x}_{f}) \cdot \mathbf{n}_{f})^{2} |f| / \sum_{f} |f|\right]^{1/2}}.$$
(7.4)

Relativna greška ukupnog proticaja kroz bunar je definisana kao

$$\epsilon_Q = \frac{Q - Q_A}{Q_A},\tag{7.5}$$

gde je Q ukupni proticaj dobijen numerički, dok je Q_A proticaj izračunat iz analitičkog rešenja.

Parametar mreže \mathfrak{h} u strukturnim mrežama označava najveću dužinu ivice ćelije. Za generisanje nestrukturnih mreža kada je u modelu prisutan bunar iskorišćen je softver Lizza [10] [21], dok je za sve ostale modele iskorišćen softver Gmsh [36]. Parametar \mathfrak{h} u nestrukturnim mrežama označava ulazni parametar za generator mreže, koji je proporcionalan veličini najveće ćelije. Mreže su nezavisno generisane tj. nisu hijerarhijski povezane. Maksimalne i minimalne izračunate vrednosti hidrauličkog potencijala su

$$h_{\max} = \max_{\mathcal{T} \in \mathcal{M}} h_{\mathcal{T}}, \quad h_{\min} = \min_{\mathcal{T} \in \mathcal{M}} h_{\mathcal{T}}.$$
 (7.6)

Greške u koncentraciji ϵ_2^C i ϵ_{\max}^C , odnosno u temperaturi ϵ_2^T i ϵ_{\max}^T , definišemo na isti način kao i za hidraulički potencijal (7.1) i (7.2). Takođe, maksimalne i minimalne izračunate vrednosti koncentracije su definisane kao i za hidraulički potencijal

$$C_{\max} = \max_{\mathcal{T} \in \mathcal{M}} C_{\mathcal{T}}, \quad C_{\min} = \min_{\mathcal{T} \in \mathcal{M}} C_{\mathcal{T}}.$$
 (7.7)

Sve vrednosti u primerima date su bez mernih jedinica. Rezultati su isti dokle god se konzistentno upotrebljavaju merne jedinice, tj. ako je recimo koeficijent filtracije zadat u metrima u sekundi onda i hidraulički potencijal mora biti izražen u metrima, itd.

Primer 1. Neka je u domenu $\Omega = (0, 1)^3$ rešenje stacionarne jednačine podzemnog strujanja (2.27) dato sa

$$h = \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{2}\right),\tag{7.8}$$

pri čemu je tenzor filtracije $\mathbb{K}=0.1\mathbb{I},$ dok je term izvora i ponora

$$q = \frac{3}{4} \cdot 0.1 \cdot \pi^2 \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{2}\right).$$
(7.9)

Nojmanov granični uslov zadat je na ravni z = 1 tačnom Darsijevom brzinom. Robinov granični uslov zadat je na ravni y = 1, a na svim ostalim delovima granice zadat je Dirihleov granični uslov tačnim hidrauličkim potencijalom (7.8). Na stranama koje pripadaju $\Gamma_{\rm R}$ zadato je $g_{\rm R}(\mathbf{x}) = 2$, dok je koeficijent transfera Ψ izračunat tako da za tačan hidraulički potencijal važi (2.53).

U Tabeli 7.1 prikazane su greške dobijene linearnom TPFA shemom na strukturnim mrežama. Rezultati pokazuju da je linearna TPFA shema prvog reda tačnosti za fluks i drugog reda tačnosti za hidraulički potencijal.

U Tabeli 7.2 pokazano je da je u ovom primeru linearna TPFA shema na nestrukturnim tetraedarskim mrežama prvog reda tačnosti za potencijal i ne konvergira za proticaj. Uopšteno, linearna TPFA shema nije konzistentna ukoliko mreža ne zadovoljava princip ortogonalnosti za tenzor. Prema tome, ne možemo očekivati da

h	ϵ^h_2	$\epsilon^h_{ m max}$	$\epsilon_2^{\mathbf{u}}$	$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$
1/10	2.69e-03	8.32e-03	1.74e-03	5.47e-02
1/20	6.73e-04	2.13e-03	4.34e-04	2.13e-03
1/40	1.56e-04	5.37e-04	1.03e-04	3.99e-04
1/80	2.79e-05	1.34e-04	3.19e-05	2.56e-04

Tabela 7.1: Greške dobijene linearnom TPFA shemom na strukturnim mrežama u Primeru 1.

Tabela 7.2: Greške dobijene linearnom TPFA shemom na nestrukturnim tetraedarskim mrežama u Primeru 1.

h	ϵ^h_2	$\epsilon^h_{ m max}$	$\epsilon_2^{\mathbf{u}}$	$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$	
1/10	2.98e-02	1.16e-02	2.23e-01	1.30e-00	
1/20	1.77e-02	7.65e-02	2.29e-01	1.80e-00	
1/40	8.90e-03	4.83e-02	2.21e-01	1.96e-00	
1/80	4.74e-03	2.65e-02	2.20e-01	1.84e-00	

Tabela 7.3: Greške dobijene linearnom MPFA shemom na nestrukturnim tetraedarskim mrežama u Primeru 1.

h	$\epsilon^h_2 \qquad \epsilon^h_{ m max}$		$\epsilon_2^{\mathbf{u}}$	$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$
1/10	1.48e-03	9.88e-03	1.78e-02	1.46e-01
1/20	4.28e-04	3.74e-03	8.46e-03	1.27 e- 01
1/40	9.61e-05	7.98e-04	3.90e-03	7.39e-02
1/80	2.44e-05	2.23e-03	1.92e-03	5.14e-02



Slika 7.1: Primer strukturne mreže $\mathfrak{h} = 1/10$.



Slika 7.2: Primer nestrukturne mreže $\mathfrak{h} = 1/10$.

rešenje uopšte konvergira s profinjavanjem mreže, što je i pokazano u sledećem primeru.

Linearna MPFA shema (dobijena kada se u jednačini (3.63) uzmu koeficijenti $\mu_{\pm} = 0.5$) je prvog reda tačnosti za fluks i drugog reda tačnosti za hidraulički potencijal i na nestrukturnim mrežama (Tabela 7.3).

Rezultati dati u Tabelama 7.4 i 7.5 pokazuju da su nelinearne sheme prvog reda

tačnosti za fluks i drugog reda tačnosti za hidraulički potencijal.

h	$\epsilon^h_2 \qquad \epsilon^h_{ m max}$		$\epsilon_2^{\mathbf{u}}$	$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$
1/10	1.91e-03	7.17e-03	1.35e-02	8.97e-02
1/20	4.87e-04	2.39e-03	6.62e-03	7.61e-02
1/40	1.17e-04	6.94 e- 04	3.09e-03	4.43e-02
1/80	3.05e-05	2.02e-04	1.55e-03	1.74e-02

Tabela 7.4: Greške dobijene nelinearnom TPFA shemom na nestrukturnim tetraedarskim mrežama u Primeru 1.

Tabela 7.5: Greške dobijene nelinearnom MPFA shemom na nestrukturnim tetraedarskim mrežama u Primeru 1.

h	ϵ^h_2	$\epsilon^h_{ m max}$	$\epsilon_2^{\mathbf{u}}$	$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$
1/10	1.91e-03	1.23e-02	2.18e-02	1.77e-01
1/20	4.37e-04	3.71e-03	9.38e-03	1.22e-01
1/40	9.93e-05	1.17e-03	4.14e-03	1.03e-01
1/80	2.42e-05	2.93e-04	1.98e-03	5.79e-02

Primer 2. U ovom primeru rešavana je stacionarna jednačina podzemnog strujanja (2.27) na domenu $\Omega = (0, 1)^2$. Neka je rešenje

$$h = \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{2}\right),\tag{7.10}$$

pri čemu je tenzor filtracije

$$\mathbb{K} = \begin{bmatrix} 5 & 3\\ 3 & 10 \end{bmatrix}. \tag{7.11}$$

Term izvora i ponora izabran je tako da je za rešenje (7.10) i tenzor filtracije (7.11) zadovoljena jednačina (2.27).

Tačan hidraulički potencijal zadat je na granici. Primer je rešavan na strukturnim kvadratnim mrežama. U ovom slučaju mreže ne zadovoljavaju uslov ortogonalnosti u odnosu na tenzor. Stoga linearna TPFA shema nije konzistentna što se vidi u Tabeli 7.6.

h	ϵ^h_2	$\epsilon^h_2 \qquad \epsilon^h_{ m max}$		$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$
1/10	6.86e-02	1.38e-01	2.42e-01	7.52e-01
1/20	7.65e-02	1.50e-01	2.52e-01	7.15e-01
1/40	8.12e-02	1.57e-01	2.58e-01	6.82e-01
1/80	8.38e-02	1.59e-01	2.60e-01	6.60e-00

Tabela 7.6: Greške dobijene linearnom TPFA shemom u Primeru 2.

Tabela 7.7: Greške dobijene linearnom MPFA shemom u Primeru 2.

\mathfrak{h}	ϵ^h_2	$\epsilon^h_{ m max}$	$\epsilon_2^{\mathbf{u}}$	$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$
1/10	5.10e-03	1.22e-02	7.89e-03	5.25e-02
1/20	1.01e-03	3.31e-03	3.09e-03	2.39e-02
1/40	1.83e-04	4.84e-04	3.20e-04	4.05e-03
1/80	4.57e-05	1.22e-04	9.28e-04	1.92e-03

Tabela 7.8: Greške dobijene nelinearnom TPFA shemom u Primeru 2.

h	ϵ^h_2	$\epsilon^h_2 \qquad \epsilon^h_{ m max}$		$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$	
1/10	8.48e-03	2.43e-02	1.48e-02	1.27 e- 01	
1/20	1.94e-03	3.89e-03	6.30e-03	5.84 e- 02	
1/40	4.47e-04	6.64 e- 04	1.97e-03	1.97e-02	
1/80	1.29e-04	2.11e-04	7.24e-04	9.49e-03	

Iako je tenzor filtracije anizotropan, linearna MPFA shema, nelinearna TPFA shema i nelinearna MPFA shema su drugog reda tačnosti za hidraulički potencijal i prvog reda za fluks (v. Tabele 7.7, 7.8 i 7.9).

h	ϵ^h_2	$\epsilon^h_{ m max}$	$\epsilon_2^{\mathbf{u}}$	$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$	
1/10	3.52e-03	8.33e-03	1.14e-02	7.05e-02	
1/20	8.11e-04	2.57e-03	4.59e-03	3.54e-02	
1/40	1.94e-04	6.81e-04	1.34e-03	8.80e-03	
1/80	4.86e-05	1.86e-04	4.82e-04	4.16e-03	

Tabela 7.9: Greške dobijene nelinearnom MPFA shemom u Primeru 2.

Primer 3. U ovom primeru rešavana je stacionarna jednačina transporta mase (4.1) kada je $\mathbf{u} = (0, 0, 0)$ i $q_C = 0$. Neka je domen jedinična kocka sa dve rupe $S_1 = [3/11, 4/11] \times [5/11, 6/11] \times [0, 1]$ i $S_2 = [7/11, 8/11] \times [5/11, 6/11] \times [0, 1]$ (Slika 7.3). Dirihleovi granični uslovi su zadati unutar rupa, i to $g_D^C = 0$ na ∂S_1 i $g_D^C = 1$



Slika 7.3: Domen u Primeru 3.

na ∂S_2 . Na ostalim delovima granice je zadato da je difuzna brzina nula $(g_N^C = 0)$. Tenzor difuzije je dat formulom

$$\mathbb{D} = R_z(\vartheta_z) \operatorname{diag}(d_1, d_2, d_3) R_z(-\vartheta_z), \qquad (7.12)$$

gde je $d_1 = d_3 = 1$, $d_2 = 0.001$
i $\vartheta_z = 67.5^\circ$, dok je $R_z(\vartheta_z)$ matrica rotacije oko os
ezza ugao ϑ_z .

90

Prethodni primer je pokazao da su linearna MPFA shema i nelinearne MPFA i TPFA sheme drugog reda tačnosti za hidraulički potencijal. Na osnovu graničnih vrednosti i principa maksimuma i minimuma znamo da je tačno rešenje između $\min_{\mathbf{x}\in\Omega} C = 0$ i $\max_{\mathbf{x}\in\Omega} C = 1$. U ovom primeru ispitaćemo da li ove sheme zadovoljavaju diskretni princip maksimuma.

	lin. MPFA		PFA nelin. TPFA		nelin.	MPFA
h	C_{\min}	C_{\max}	C_{\min}	C_{\max}	 C_{\min}	C_{\max}
1/10	-0.55	1.50	3.92e-03	1.95	3.66e-03	0.99658
1/20	-0.20	1.20	8.55e-04	1.42	6.95e-04	0.99937
1/40	-0.02	1.03	1.23e-04	1.05	8.37e-05	0.99991

Tabela 7.10: Minimalne i maksimalne vrednosti koncentracije u Primeru 3.

Primer je rešavan na nestrukturnim tetraedarskim mrežama. Rezultati prikazani u drugoj i trećoj koloni u Tabeli 7.10 pokazuju da je za linearnu MPFA shemu narušen diskretni princip maksimuma i minimuma. Nelinearna TPFA shema ne zadovoljava diskretni princip maksimuma, ali zadovoljava pozitivnost rešenja, što i pokazuju rezultati u četvrtoj i petoj koloni Tabele 7.10. Nelinearna MPFA shema zadovoljava princip maksimuma što i pokazuju rezultati u šestoj i sedmoj koloni u Tabeli 7.10.

Primer 4. Neka se domen $\Omega = (0, 1)^3$ stacionarne jednačine podzemnog strujanja sastoji od dve materijalne zone u kojima je tenzor filtracije:

$$\mathbb{K} = \begin{cases} \mathbb{K}_1, \text{ ako je } x < 0.5, \\ \mathbb{K}_2, \text{ inače,} \end{cases} \qquad \mathbb{K}_1 = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \mathbb{K}_2 = \begin{bmatrix} 10 & 3 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (7.13)$$

Neka je tačno rešenje dato formulom

$$h(x, y, z) = \begin{cases} 1 - 2y^2 + 4xy + 2y + 6x, & x < 0.5\\ 3.5 - 2y^2 + 2xy + x + 3y, & x \ge 0.5. \end{cases}$$
(7.14)

Tada je term izvora i ponora:

$$q = \begin{cases} 4, & x < 0.5, \\ -8, & x \ge 0.5. \end{cases}$$
(7.15)

Na granici y = 0 zadat je tačan Darsijev fluks. Robinov granični uslov je zadat na x = 0, tako da je $g_{\rm R} = 0$ a Ψ je izračunato tako da za tačan hidraulički potencijal važi (2.53). Na ostalim delovima granice zadat je tačan hidraulički potencijal.

Ovaj primer je rešavan na nestrukturnim tetraedarskim mrežama (Slika 7.2).

Tabela 7.11: Greške dobijene nelinearnom TPFA shemom u Primeru 4.

h	ϵ^h_2	$\epsilon^h_2 \qquad \epsilon^h_{ m max}$		$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$	
1/10	3.15e-04	1.45e-03	5.43e-03	4.37e-02	
1/20	6.54 e- 05	4.63e-04	2.46e-03	2.22e-02	
1/40	1.43e-05	9.76e-05	1.17e-03	1.37e-02	
1/80	3.50e-05	3.32e-05	5.64 e- 04	8.46e-03	

Tabela 7.12: Greške dobijene nelinearnom MPFA shemom u Primeru 4.

h	$\epsilon_2^h \qquad \epsilon_{\max}^h$		$\epsilon_2^{\mathbf{u}}$	$\epsilon^{\mathbf{u}}_{\max}$	
1/10	4.68e-04	2.44e-03	6.85e-03	9.92e-02	
1/20	9.34e-05	5.07e-04	2.80e-03	3.52e-02	
1/40	2.39e-05	1.38e-04	1.28e-03	1.91e-02	
1/80	6.16e-06	4.10e-05	6.00e-04	1.00e-02	

Rezultati prikazani u tabelama 7.11 i 7.12 dobijeni su korišćenjem lokalne koordinatne transformacije (Poglavlje 3.3) na stranama na kojima postoji diskontinuitet u tenzoru filtracije. Ovi rezultati pokazuju da su nelinearna TPFA i nelinearna MPFA sheme prvog reda tačnosti za fluks i drugog reda tačnosti za hidraulički potencijal, bez obzira na prisustvo diskontinuiteta u modelu. Stoga zaključujemo da se uklanjanjem diskontinuiteta na stranama lokalnom koordinatnom transformacijom (Poglavlje 3.3) ne smanjuje red tačnosti nelinearne TPFA i nelinearne MPFA sheme. **Primer 5.** U ovom primeru rešavana je stacionarna jednačina trasporta mase (4.1) kada je $\mathbf{u} = (0, 0, 0)$ i $q_C = 0$. Neka je domen $\Omega = (0, 1)^3 \setminus (S_1 \cup S_2)$, pri čemu je $S_1 = [0.2, 0.4] \times [0.4, 0.6] \times [0, 1]$ i $S_2 = [0.6, 0.8] \times [0.4, 0.6] \times [0, 1]$. Tenzor difuzije i disperzije je dat formulom:

$$\mathbb{D} = \begin{cases} \mathbb{D}_1, \text{ ako je } (x < 0.5 \land y < 0.5) \lor (x > 0.5 \land y > 0.5) \\ \mathbb{D}_2, \text{ inače} \end{cases}, \quad (7.16)$$

$$\mathbb{D}_i = R_z(\vartheta_i) \operatorname{diag}(d_1, d_2, d_3) R_z(-\vartheta_i), \qquad (7.17)$$

gde je $d_1 = d_3 = 1, d_2 = 0.001, \vartheta_1 = 22.5^\circ, \vartheta_2 = 67.5^\circ, \text{ dok je } R_z(\vartheta_i)$ matrica rotacije oko ose z za uga
o ϑ_i .

Na delu granice ∂S_1 zadat je Dirihleov granični uslov $g_D^C = 0$, dok je na delu granice ∂S_2 zadato $g_D^C = 1$. Na ostalim delovima granice je zadato da je difuzni proticaj jednak nuli $(g_N^C = 0)$. Na osnovu principa maksimuma i minimuma imamo da je $\min_{\mathbf{x}\in\Omega} C = 0$ i $\max_{\mathbf{x}\in\Omega} C = 1$.

Ovaj primer je rešavan na nestrukturnim prizmatičnim mrežama (Slika 7.4).



Slika 7.4: Nestrukturna prizmatična mreža $\mathfrak{h} = 1/10$ korišćena u Primeru 5.

Rezultati prikazani u Tabeli 7.13 dobijeni su uklanjanjem diskontinuiteta na stranama lokalnom koordinatnom transformacijom (Poglavlje 3.3).

Rezultati prikazani u drugoj i trećoj koloni u Tabeli 7.13 pokazuju da nelinearna TPFA shema sa lokalnom koordinatnom transformacijom na stranama na kojima

	nelin. TPFA			nelin. MPFA		
h	C_{\min}	C_{\max}		C_{\min}	C_{\max}	
1/10	2.80e-05	1.26		4.23e-03	0.998749	
1/20	6.91e-04	1.50		2.56e-04	0.999495	
1/40	5.51e-05	1.68		7.90e-06	0.999991	

Tabela 7.13: Minimalne i maksimalne vrednosti koncentracije u Primeru 5.

postoji diskontinuitet zadržava pozitivnost. Četvrta i peta kolona u Tabeli 7.13 pokazuju da lokalna koordinatna transformacija ne narušava princip maksimuma i minimuma nelinearne MPFA sheme.

Primer 6. Neka je krug $x^2 + y^2 = R^2$ domen stacionarne jednačine podzemnog strujanja (2.27) sa izotropnim tenzorom filtracije $\mathbb{K} = K\mathbb{I}$. Neka se bunar poluprečnika r nalazi u centru kružnog domena. Na osnovu Odeljka 3.4.1 rešenje stacionarne jednačine podzemnog strujanja (2.27) je dato jednačinom (3.95), što možemo zapisati kao

$$h(\rho) = \frac{h_r \ln \frac{R}{\rho} + h_R \ln \frac{\rho}{r}}{\ln \frac{R}{r}}.$$
(7.18)

U ovom primeru postavljamo da je r = 0.05, R = 200, $h_w = 55$, $h_R = 100$ i K = 1e - 04. Vrednost koeficijenta transfera u jednačini (3.88) je postavljena tako da je $h_r = 60$.

U Tabeli 7.14 predstavljene su greške dobijene nelinearnom TPFA shemom. Ova shema bez korekcije nije drugog reda tačnosti i daje potpuno pogrešan proticaj kroz bunar. Čak i na najfinijoj mreži razmatranoj u ovom primeru proticaj kroz bunar je za 50% veći od analitičkog rešenja. Greška hidrauličkog potencijala je veća u okolini bunara (Slika 7.5 levo), što je i očekivano jer se gradijent hidrauličkog potencijala tu najbrže menja.

Korišćenjem WFC sheme dobijamo da je greška u proticaju kroz bunar oko 1% a greške u hidrauličkom potencijalu su značajno manje. Nažalost u WFC shemi sa profinjavanjem mreže ne dolazi do poboljšanja rezultata. Greška je i dalje veća u okolini bunara (Slika 7.5 sredina).

h	$32\sqrt{2}$	$16\sqrt{2}$	$8\sqrt{2}$	$4\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$
shema bez korekcije						
ϵ^h_2	8.46e-02	6.65e-02	4.61e-02	3.61e-02	2.67 e- 02	1.93e-02
$\epsilon^h_{\rm max}$	2.25e-01	2.20e-01	2.05e-01	1.87e-01	1.65e-01	1.37e-01
ϵ_Q	2.33e+00	1.78e + 00	1.22e + 00	9.59e-01	7.12e-01	5.17e-01
WFC shema						
ϵ_2^h	1.37e-03	8.46e-04	6.36e-04	4.54e-04	4.29e-04	4.86e-04
$\epsilon^h_{\rm max}$	2.02e-02	7.64e-03	7.12e-03	6.41e-03	6.33e-03	6.65e-03
ϵ_Q	9.60e-03	1.17e-02	1.01e-02	1.18e-02	1.12e-02	1.32e-02
NWC shema						
ϵ^h_2	7.65e-04	2.04e-04	4.98e-05	8.30e-06	1.86e-06	4.92e-07
$\epsilon^h_{\rm max}$	3.37e-03	1.22e-03	6.43e-04	8.16e-05	1.91e-06	5.81e-06
ϵ_Q	-4.42e-03	2.60e-04	8.13e-05	-1.44e-05	-1.16e-06	-4.97e-07

Tabela 7.14: Greške dobijene nelinearnom TPFA shemom u primeru 6.



Slika 7.5: Apsolutna greška hidrauličkog potencijala dobijena nelinearnom TPFA shemom na mreži $\mathfrak{h} = 4\sqrt{2}$ u Primeru 6 bez popravke (levo), WFC shemom (sredina) i NWC shemom (desno).

Za oblast u kojoj je korišćena NWC shema je uzeta kružna okolina bunara poluprečnika 50. Rezultati predstavljeni u Tabeli 7.14 pokazuju da je shema drugog reda tačnosti za hidraulički potencijal i da se greška proticaja u bunaru smanjuje sa profinjavanjem mreže. U ovom slučaju greška hidrauličkog potencijala je data na Slici 7.5 desno.

Isti zaključci važe i za nelinearnu MPFA shemu. Greške nelinearne MPFA sheme su date u Tabeli 7.15.

h	$32\sqrt{2}$	$16\sqrt{2}$	$8\sqrt{2}$	$4\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	
shema bez korekcije							
ϵ_2^h	3.35e-02	3.37e-02	3.17e-02	2.90e-02	2.35e-02	1.53e-02	
$\epsilon^h_{\rm max}$	9.76e-02	1.24e-01	1.55e-01	1.63e-01	1.57e-01	1.21e-01	
ϵ_Q	-9.71e-01	-9.48e-01	-8.85e-01	-8.04e-01	-6.50e-01	-4.21e-01	
WFC	shema						
ϵ_2^h	1.63e-03	9.08e-04	6.95-04	5.01e-04	4.58e-04	5.88e-04	
$\epsilon^h_{\rm max}$	7.72e-03	9.18e-03	7.90e-03	7.41e-03	6.90e-03	6.77e-03	
ϵ_Q	1.02e-02	1.26e-02	1.08e-02	1.34e-02	1.21e-02	1.60e-02	
NWC shema							
ϵ_2^h	8.19e-04	2.09e-04	5.60e-05	1.01e-05	2.27e-06	5.92e-07	
$\epsilon^h_{\rm max}$	3.74e-03	1.31e-03	6.25e-04	9.68e-05	2.29e-05	5.81e-06	
ϵ_Q	6.33e-03	4.74e-04	1.41e-04	2.52e-05	8.74e-06	2.14e-06	

Tabela 7.15: Greške dobijene nelinearnom MPFA shemom u primeru 6.

Primer 7. Neka je domen stacionarne jednačine podzemnog strujanja pravougaonik sa temenima (±300,±150). U modelu su prisutna dva bunara sa centrima u $\mathbf{x}_l =$ (-150,0) i $\mathbf{x}_r = (150,0)$, prečnika $r_l = 0.5$ i $r_r = 0.6$, respektivno. Tenzor filtracije u modelu je

$$\mathbb{K} = 10^{-4} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 8 \end{bmatrix}.$$
(7.19)

Analitičko rešenje dobijeno je superpozicijom dva analitička rešenja oblika (3.95)

$$h = \frac{h_{R_{\rm l}} - h_{r_{\rm l}}}{\ln \frac{R_{\rm l}}{r_{\rm l}}} \ln \|S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\rm l})\| + \frac{h_{r_{\rm l}} \ln R_{\rm l} - h_{R_{\rm l}} \ln r_{\rm l}}{\ln \frac{R_{\rm l}}{r_{\rm l}}} + \frac{h_{R_{\rm r}} - h_{r_{\rm r}}}{\ln \frac{R_{\rm r}}{r_{\rm r}}} \ln \|S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\rm r})\| + \frac{h_{r_{\rm r}} \ln R_{\rm r} - h_{R_{\rm r}} \ln r_{\rm r}}{\ln \frac{R_{\rm r}}{r_{\rm r}}}.$$
(7.20)

U ovom primeru postavljamo da je $h_{R_l} = h_{R_r} = 20$, $R_l = R_r = 1200$, $h_{r_l} = 5$ i $h_{r_r} = 10$. Vrednost koeficijenta transfera Ψ je izabrana posebno za svaku bunarsku stranu tako da je hidraulički potencijal 23 u levom bunaru i 27 u desnom bunaru.

Na spoljašnjem delu granice je zadat Dirihleov granični uslov tačnom vrednošću hidrauličkog potencijala.

Tabela 7.16: Greške dobijene nelinearnom TPFA shemom u primeru 7.

h	32	16	8	4	2		
shema bez korekcije							
ϵ_2^h	3.09e-02	1.06e-02	6.25e-03	2.50e-03	1.67e-03		
$\epsilon^h_{\rm max}$	1.31e-01	1.26e-01	1.05e-01	3.47e-02	4.03e-02		
ϵ_{Q_l}	2.90e-01	2.31e-01	1.88e-01	1.97e-01	1.21e-01		
ϵ_{Q_r}	7.37e-02	2.57e-01	7.82e-02	1.35e-01	9.16e-02		
WFC shema							
ϵ_2^h	2.02e-02	6.01 e- 03	3.30e-03	1.18e-03	7.64e-04		
$\epsilon^h_{\rm max}$	8.85e-02	8.00e-02	7.47e-02	3.27e-02	3.07e-02		
ϵ_{Q_l}	-7.91e-02	-9.54e-02	-7.38e-02	3.22e-02	2.48e-02		
ϵ_{Q_r}	-9.61e-02	3.11e-02	-3.05e-02	2.88e-02	3.33e-02		
NWC shema							
ϵ_2^h	7.62e-04	2.33e-04	7.13e-05	2.30e-05	5.53e-06		
$\epsilon^h_{\rm max}$	4.95e-03	2.08e-03	6.11e-04	3.24e-04	7.03e-05		
ϵ_{Q_l}	-4.83e-04	-2.75e-04	9.91 e- 05	3.85e-05	6.90e-06		
ϵ_{Q_r}	-1.19e-04	4.36e-04	6.55e-05	2.40e-05	8.43e-06		
h	32	16	8	4	2		
------------------------	-------------	----------	----------	----------	------------		
shem	a bez korek	cije					
ϵ_2^h	5.92e-03	3.27e-03	2.83e-03	1.99e-03	1.58e-03		
$\epsilon^h_{\rm max}$	4.64e-02	3.04e-02	2.60e-02	2.01e-02	2.91e-02		
ϵ_{Q_l}	-2.53e-01	1.89e-01	2.73e-01	1.69e-01	1.28e-01		
ϵ_{Q_r}	5.72e-02	2.64e-01	1.18e-01	1.02e-01	9.33e-02		
WFC	shema						
ϵ_2^h	4.25e-03	3.42e-03	1.88e-03	1.22e-03	9.69e-04		
$\epsilon^h_{\rm max}$	3.33e-02	3.40e-02	4.20e-02	2.81e-02	3.64 e- 02		
ϵ_{Q_l}	5.41e-02	6.73e-02	7.48e-02	5.96e-02	6.77e-02		
ϵ_{Q_r}	4.06e-02	4.88e-02	3.29e-02	4.59e-02	5.39e-02		
NWC	shema						
ϵ_2^h	1.32e-03	5.17e-04	1.67e-04	6.23e-05	1.47e-05		
$\epsilon^h_{\rm max}$	6.92e-03	3.48e-03	1.48e-03	9.61e-04	2.06e-04		
ϵ_{Q_l}	1.35e-03	9.21e-04	6.32e-04	1.41e-04	3.47e-05		
ϵ_{Q_r}	4.69e-03	2.42e-03	4.45e-04	7.91e-05	3.42e-05		

Tabela 7.17: Greške dobijene nelinearnom MPFA shemom u primeru 7.

_

Slično kao i u prethodnom primeru nelinearna TPFA shema i nelinearna MPFA shema bez korekcije daju netačan proticaj (tabele 7.16 i 7.17). Sa popravkom fluksa na bunarskim stranama (WFC shema) dobija se tačniji proticaj, ali sa profinjavanjem mreže ne dolazi do povećanja tačnosti. Za oblast u kojoj je korišćena NWC shema uzete su kružne okoline bunara poluprečnika $\rho = 100$. Rezultati prikazani u tabelama 7.16 i 7.17 pokazuju da su i nelinearna TPFA i nelinearna MPFA shema sa NWC shemom u okolini bunara drugog reda tačnosti za hidraulički potencijal. Sa NWC shemom greške u proticaju bunara su najmanje.



Slika 7.6: Apsolutna greška hidrauličkog potencijala dobijena nelinearnom MPFA shemom na mreži $\mathfrak{h} = 8$ u Primeru 7 bez popravke (levo), WFC shemom (sredina), NWC shemom (desno).

Na Slici 7.6 je predstavljena distribucija apsolutne greške hidrauličkog potencijala dobijena nelinearnom MPFA shemom.

Primer 8. Neka je domen stacionarne jednačine podzemnog strujanja kvadar sa temenima ($\pm 100, \pm 50, \pm 50$). Neka se u domenu nalazi horizontalni bunar od (-50, -50, 0) do (-50, 50, 0) i vertikalni bunar od (50, 0 - 50) do (50, 0, 50).

Analitičko rešenje je dobijeno superpozicijom dva analitička rešenja oblika (7.18)

$$h(\mathbf{x}) = \frac{h_{r_h} \ln \frac{R_h}{\rho_h} + h_{R_h} \ln \frac{\rho_h}{r_h}}{\ln \frac{R_h}{r_h}} + \frac{h_{r_v} \ln \frac{R_v}{\rho_r} + h_{R_v} \ln \frac{\rho_v}{r_v}}{\ln \frac{R_v}{r_v}},$$
(7.21)

pri čemu su

$$\rho_h = \sqrt{(x - x_h)^2 + (z - z_h)^2}, \quad \rho_v = \sqrt{(x - x_v)^2 + (y - y_v)},$$
(7.22)

gde su $x_h = -50$, $z_h = 0$, $x_v = 50$ i $y_v = 0$. U ovom primeru uzimamo da je $R_h = R_v = 1000$, $h_{R_h} = 50$, $h_{R_v} = 53$, $r_h = 0.1$, $r_v = 0.15$, $h_h = 40$ i $h_v = 45$. Transfer

99

koeficijent je izabran u skladu sa Hagen-Poisilovim zakonom tako da je hidraulički potencijal na pumpi u horizontalnom bunaru 90, odnosno 92 na pumpi u vertikalnom bunaru. Pumpa je u horizontalnom bunaru locirana u tački (-50, -50, 0), odnosno u tački (50, 0, -50) u vertikalnom bunaru.

h	16	8	4	2			
shema	shema bez korekcije						
ϵ_2^h	1.01e-02	7.31e-03	4.66e-03	3.05e-03			
$\epsilon^h_{\rm max}$	3.03e-02	3.28e-02	2.94e-02	2.44e-02			
ϵ_{Q_h}	2.38e-00	1.69e-00	1.13e-00	7.41e-01			
ϵ_{Q_v}	2.73e-00	1.93e-00	1.14e-00	7.24e-01			
WFC	shema						
ϵ^h_2	4.88e-04	1.99e-04	8.38e-05	5.63e-05			
$\epsilon^h_{\rm max}$	2.91e-03	3.03e-03	1.62e-03	1.04e-03			
ϵ_{Q_h}	1.66e-02	3.89e-03	1.93e-03	-2.29e-03			
ϵ_{Q_v}	1.69e-02	1.70e-02	1.61e-02	1.67e-02			
NWC shema							
ϵ_2^h	6.94 e- 05	1.75e-05	4.44e-06	1.15e-06			
$\epsilon^h_{\rm max}$	2.46e-04	6.24 e- 05	2.50e-05	7.27e-06			
ϵ_{Q_h}	1.29e-03	9.09e-05	5.55e-05	2.41-05			
ϵ_{Q_v}	-4.40e-04	2.70e-05	1.82e-05	1.01e-05			

Tabela 7.18: Greške dobijene nelinearnom TPFA shemom u primeru 8.

U tabelama 7.16 i 7.17 date su greške u primeru 8. Oblasti u kojima je primenjena NWC shema su cilindrične okoline bunara sa poluprečnikom $\rho = 30$. Površine Lambertovih cilindričnih projekcija dobijaju se Gaus-Ležandrovom kvadraturnom formulom sa šest čvorova sa mašinskom tačnošću.

Rezultati pokazuju da i u trodimenzionalnom slučaju važi isti zaključci kao i u dvodimenzionalnom slučaju, tj. važi da: nelinearna TPFA shema i nelinearna MPFA shema bez korekcije daju netačan proticaj; sa popravkom fluksa na bunarskim stranama (WFC shema) dobija se tačniji proticaj, ali se profinjavanjem mreže ne dobija povećanje tačnosti; hidraulički potencijal dobijen korišćenjem NWC sheme u okolini bunara je drugog reda tačnosti.

h	16	8	4	2		
shema bez korekcije						
ϵ^h_2	3.84e-03	3.63e-03	2.78e-03	1.70e-03		
$\epsilon^h_{\rm max}$	1.82e-02	1.83e-02	2.01e-02	1.68e-02		
ϵ_{Q_h}	-8.54e-01	-8.22e-01	-6.75e-01	-4.52e-01		
ϵ_{Q_v}	-8.33e-01	-7.30e-01	-4.84e-01	-2.20e-01		
WFC	shema					
ϵ^h_2	4.86e-04	1.86e-04	9.09e-05	6.13e-05		
$\epsilon^h_{\rm max}$	3.38e-03	2.41e-03	2.02e-03	1.25e-02		
ϵ_{Q_h}	1.96e-02	4.81e-03	3.86e-04	-9.42e-04		
ϵ_{Q_v}	1.95e-02	1.90e-02	1.78e-02	1.84e-02		
NWC shema						
ϵ_2^h	6.39e-05	1.77e-05	4.71e-06	1.25e-06		
$\epsilon^h_{\rm max}$	2.20e-04	6.88e-05	2.58e-05	6.26e-06		
ϵ_{Q_h}	1.32e-03	8.36e-05	-2.02e-05	-1.70-05		
ϵ_{Q_v}	-2.36e-04	2.17e-04	2.69e-05	2.37e-05		

Tabela 7.19: Greške dobijene nelinearnom MPFA shemom u primeru 8.

Primetimo da su u ovom primeru rezultati WFC sheme tačniji nego u prethodnom primeru. Kako WFC shema predstavlja konačnu razliku u pravcu normalnom na bunar, aproksimacija unosi manju grešku u izotropnom slučaju nego u anizotropnom slučaju.

Primer 9. U ovom primeru razmatrana je jednodimeziona evolutivna Ričardsova

jednačina (2.38) u prostornom domenu $z \in [0, 1]$. Neka je koeficijent filtracije $K = 7 \cdot 10^{-5}$, poroznost $\varepsilon = 0.44$ i neka su parametri Mualem–van Genuhtenovog modela $a = 7, n = 4.51, s_{\rm s} = 0.44, s_{\rm r} = 0.19$. U tački z = 1 zadat je hidraulički potencijal $h^{\rm U} = 0.9 \ (\psi^{\rm U} = -0.1)$, dok je u tački z = 0 zadat hidraulički potencijal $h^{\rm L} = -1$ $(\psi^{\rm L} = -1)$. Početno rešenje je dato sa $h_0 = z - 1 \ (\psi_0 = -1)$. Budući da je $\Delta \psi / \Delta z > 0$ i $h^{\rm U} > h^{\rm L}$ ovaj slučaj predstavlja infiltraciju (v. Poglavlje 3.6.1).



Slika 7.7: Visina pritiska u trenutku t = 1200 dobijena za različite metode usrednjavanja relativne propusnosti.

Korišćenjem različitih metoda za usrednjavanje relativne propusnosti na mreži $\mathfrak{h} = 0.1$ dobijeni su rezultati prikazani na Slici 7.7. Sa ove slike vidi se da usrednjavanje harmonijskom (k_r^{HARM}) ili geometrijskom sredinom (k_r^{GEOM}) dovodi do velikog precenjivanja vrednosti visine pritiska. Profinjavanjem mreže usrednjavanje k_r^{GEOM} daje tačnije vrednosti visine pritiska. Međutim, za usrednjavanje k_r^{HARM} profinjavanje mreže ne dovodi do tačnijeg rešenja.

Na slici 7.7 je takođe moguće u
očiti da aritmetička $(k_{\rm r}^{\rm ARIT})$ i integralna
 $(k_{\rm r}^{\rm INT})$ sredina krše princip maksimuma.

Primer 10. Prethodni primer je predstavio tok u režimu infiltracije, dok se u ovom primeru razmatra tok u režimu drenaže. Rešavana je jednodimeziona evolutivna Ričardsova jednačina (2.38) u prostornom domenu $z \in (0,5)$. Neka je koeficijent filtracije $K = 10^{-3}$, poroznost $\varepsilon = 0.44$ i neka su parametri Mualem–van Genuhtenovog modela a = 6, n = 2.51, $s_{\rm s} = 0.44$, $s_{\rm r} = 0.19$. U tački z = 5 zadat je Nojmanov granični uslov $g_{\rm N} = 0$, dok je u tački z = 0 zadat hidraulički potencijal $h^{\rm L} = -0.1$ ($\psi^{\rm L} = -0.1$). Početno rešenje je $h_0 = z - 0.1$ ($\psi_0 = -0.1$).



Slika 7.8: Visina pritiska u trenutku t = 2000 dobijena za različite metode usrednjavanja relativne propusnosti u Primeru 10.

Problem je rešavan na mreži $\mathfrak{h} = 0.5$. Usrednjavanja $k_{\mathrm{r}}^{\mathrm{NS}}$ i $k_{\mathrm{r}}^{\mathrm{UPG}}$ su identična u slučaju drenaže. Na Slici 7.8 možemo videti da usrednjavanja $k_{\mathrm{r}}^{\mathrm{ARIT}}$, $k_{\mathrm{r}}^{\mathrm{GEOM}}$ i $k_{\mathrm{r}}^{\mathrm{INT}}$ proizvode oscilacije u visini pritiska.

Na osnovu ovog i prethodnog primera možemo zaključiti da sredina $k_{\rm r}^{\rm HARM}$ dovodi do velikog precenjivanja vrednosti visine pritiska u slučaju infiltracije, a da sredine $k_{\rm r}^{\rm ARIT}$, $k_{\rm r}^{\rm GEOM}$ i $k_{\rm r}^{\rm INT}$ u slučaju drenaže dovode do oscilacija u visini pritiska. Korišćenje sredina $k_{\rm r}^{\rm NS}$ i $k_{\rm r}^{\rm UPG}$ ne dovodi do oscilacija u visini pritiska. **Primer 11.** U ovom primeru rešavana je stacionarna Ričardsova jednačina (2.41). Neka je domen kocka $\Omega = (0, 1)^3$ sa izotropnim tenzorom filtracije $\mathbb{K} = K\mathbb{I}$. Dirihleovi granični uslovi su zadati na ravnima z = 1 i z = 0 konstantnim hidrauličkim potencijalima h^{U} i h^{L} . Na ostalim delovima granice zadat je Nojmanov granični uslov $g_{N} = 0$. Problem je rešavan na tetraedarskim nestrukturnim mrežama.

Za određivanje relativne propusnosti iskorišćen je Gardnerov model (2.49), sa parametrom A = 2.38. Za koeficijent filtracije u ovom primeru uzeto je $K = 6.9 \cdot 10^{-3}$. U zavisnosti od režima strujanja izabrana je vrednost Dirihleovog graničnog uslova za

- infiltraciju $h^{\rm U}=0.9~(\psi^{\rm U}=-0.1)$ i $h^{\rm L}=-1~(\psi^{\rm L}=-1),$
- drenažu $h^{\rm U}=0~(\psi^{\rm U}=-1)$ i $h^{\rm L}=-0.1~(\psi^{\rm L}=-0.1),$
- kapilarno izdizanje $h^{\rm U} = -0.2 \ (\psi^{\rm U} = -1.2)$ i $h^{\rm L} = -0.1 \ (\psi^{\rm L} = -0.1)$.

Fabela 7.20: Greške u Primeru 11 sa usrednjavanjem k_r^{N}	Tabela 7.20: Greške u Primeru 11 sa usrednjavan	$jem k_r^{N}$	3.
--	---	---------------	----

h	1/5	1/10	1/20	1/40			
infiltr	infiltracija						
ϵ_2^h	1.18e-04	3.87e-05	1.07 e-05	2.98e-06			
$\epsilon^h_{\rm max}$	3.49e-04	9.77e-05	2.86e-05	7.92e-06			
drena	ıža						
ϵ_2^h	3.14e-05	1.29e-05	4.19e-06	2.14e-06			
$\epsilon^h_{\rm max}$	8.84e-05	3.22e-05	1.05e-05	4.89e-06			
kapilarno izdizanje							
ϵ^h_2	3.29e-05	1.31e-05	4.16e-06	2.10e-06			
$\epsilon^h_{\rm max}$	9.60e-05	3.39e-05	1.21e-05	5.23e-06			

Za aproksimaciju fluksa je iskorišćena nelinearna TPFA shema, dok je usrednjavanje relativne propusnosti izvedeno sa k_r^{NS} i k_r^{UPG} . Dobijene greške prikazane u

Tabeli 7.20 pokazuju da kada se za usrednjavanje koristi $k_{\rm r}^{\rm NS}$ tačnost varira od prvog do drugog reda u zavisnosti od režima strujanja. Ovo je posledica usrednjavanja $k_{\rm r}^{\rm NS}$ jer je nelinearna TPFA shema drugog reda tačnosti (v. Primer 1).

h	1/5	1/10	1/20	1/40		
infiltracija						
ϵ_2^h	3.41e-03	2.11e-03	1.17e-03	6.43e-04		
$\epsilon^h_{\rm max}$	7.51e-03	4.33e-03	2.65e-03	1.46e-03		
drena	ıža					
ϵ_2^h	3.14e-05	1.29e-05	4.19e-06	2.14e-06		
$\epsilon^h_{\rm max}$	8.84e-05	3.22e-05	1.05e-05	4.89e-06		
kapilarno izdizanje						
ϵ^h_2	2.07e-05	9.04e-06	5.71e-06	2.84e-06		
$\epsilon^h_{\rm max}$	7.27e-05	2.61e-05	1.58e-05	6.96e-06		

Tabela 7.21: Greške u Primeru 11 sa usrednjavanjem $k_{\rm r}^{\rm UPG}.$

Primetimo da za drenažu važi $k_{\rm r}^{\rm NS} = k_{\rm r}^{\rm UPG}$, pa su stoga greške u Tabelama 7.20 i 7.21 za drenažu identične. Za razliku od usrednjavanja $k_{\rm r}^{\rm NS}$, u slučaju usrednjavanja $k_{\rm r}^{\rm UPG}$ rešenje je uvek prvog reda tačnosti.

Primer 12. U ovom primeru razmatrana je stacionarna jednačina transporta energije (4.5) u domenu $\Omega = (0, 1)^3$. Neka je tačno rešenje

$$T = x^2 y^2 z^2, (7.23)$$

i neka je

$$\mathbf{u}c_{\mathbf{w}}\rho = (1,0,0) \quad \mathbf{i} \quad \lambda = l\mathbb{I}. \tag{7.24}$$

Term izvora i ponora je

$$q_T = 2y^2 z^2 (x - l) - 2lx^2 z^2 - 2lx^2 y^2.$$
(7.25)

105

Na granici x = 1 zadat je Nojmanov granični uslov

$$g_{\rm N}^T = -2lxy^2z^2 - 2lx^2yz^2 - 2lx^2y^2z, \qquad (7.26)$$

dok je na ostalim delovima granice zadat Dirihleov granični uslov tačnom vrednošću koncentracije (7.23).

U ovom primeru želimo da proverimo tačnost metoda za diskretizaciju advektivnog terma. Ukoliko uzmemo da je l = 0.01 u problemu dominira advekcija. Za diskretizaciju difuznog terma korišćena je nelinearna TPFA shema. Rezultati su dobijeni na nestrukturnim tetraedardskim mrežama.

Tabela 7.22: Greške dobijene uzvodnom shemom u Primeru 12.

h	1/10	1/20	1/40	1/80
ϵ_2^T	5.20e-02	2.68e-02	1.27e-02	6.39e-03
$\epsilon_{\rm max}^T$	5.33e-01	4.23e-01	1.28e-01	6.90e-02

Rezultati prikazani u Tabeli 7.22 pokazuju da je uzvodna diskretizacija advektivnog terma (4.7) prvog reda tačnosti.

Tabela 7.23: Greške dobijene linearnom popravkom uzvodne sheme u Primeru 12.

\mathfrak{h}	1/10	1/20	1/40	1/80
ϵ_2^T	5.74e-03	1.17e-03	2.41e-04	6.13e-05
ϵ_{\max}^T	5.46e-02	2.14e-02	5.57e-03	1.30e-03

Rezultati prikazani u Tabeli 7.23 pokazuju da linearnom popravkom uzvodne sheme (4.9) dobijamo shemu drugog reda tačnosti.

Limiter Barta i Džaspersena (4.18) sprečava konvergenciju do stacionarnog rešenja. Rezultati prikazani u Tabeli 7.24 dobijeni su limiterom Barta i Džaspersena uz istorijsku modifikaciju tako da limiteru posle desete iteracije nije dozvoljeno da raste. Rezultati pokazuju da je ovako dobijena shema malo manje tačna od sheme (4.9).

-	h	1/10	1/20	1/40	1/80
_	ϵ_2^T	7.57e-03	1.65e-03	4.27e-04	1.13e-04
	$\epsilon_{\rm max}^T$	1.22e-01	5.06e-02	1.77e-02	7.81e-03

Tabela 7.24: Greške dobijene limiterom Barta i Džaspersena sa istorijskom modifikacijom u Primeru 12.

Primer 13. U domenu $\Omega = (0,1)^3$ rešavana je stacionarna jednačina transporta mase (4.1) za

$$\mathbb{D} = 10^{-6} \mathbb{I}, \quad q_C = 0 \tag{7.27}$$

i konstantnu brzinu

$$\mathbf{u} = (2 \cdot 10^{-5}, 0, 0) \tag{7.28}$$

Na delu granice x = 0 zada je Dirihleov granični uslov $g_D^C = 1$. Na ostalim delovima granice zadat je Nojmanov granični uslov $g_N^C = 0$. Ovo znači da je na tom delu difuzni fluks jednak nuli (v. (2.68)), dok rastvorena materija može napuštati domen advekcijom.

Primetimo da na osnovu graničnih vrednosti i principa maksimuma i minimuma važi da je tačno rešenje između $\min_{\mathbf{x}\in\Omega} C = 0$ i $\max_{\mathbf{x}\in\Omega} C = 1$.

U Tabeli 7.25 prikazani su rezultati dobijeni na nestrukturnoj mreži $\mathfrak{h} = 1/10$ (Slika 7.2). Rezultati potvrđuju da uzvodna shema zadovoljava princip maksimuma i minimuma (prva i druga kolona u Tabeli 7.25). Popravka uzvodne sheme bez limitera (4.9) krši princip maksimuma i minimuma (treća i četvrta kolona u Tabeli 7.25). Da bi popravka linearne sheme uz pomoć limitera Barta i Džaspersena konvergirala uzimamo istorijsku modifikaciju tako da limiteru posle deset iteracija nije dozvoljeno da raste. Ovakva shema zadovoljava princip maksimuma i minimuma

Primer 14. U ovom primeru razmatran je uticaj sorpcije i degradacije na transport zagađenja. Više o uticaju sorpcije i degradacije na zagađenje u zonama sanitarne zaštite Beogradskog izvorišta moguće je pronaći u radu [22].

Prostorni domen modela je $\Omega = (0, 800 \text{ m}) \times (0, 500 \text{ m})$ (Slika 7.9), posmatrani vremenski interval je od 0 do 300 dana.

uzvodna shema shema bez		oez limitera	shema sa l	imiterom	
C_{\min}	C_{\max}	C_{\min}	C_{\max}	C_{\min}	C_{\max}
8.53e-11	1	-0.06	1.03	1.27e-10	1

Tabela 7.25: Minimalne i maksimalne vrednosti koncentracije u Primeru 13.

Duž granice y = 0 m nalazi se reka u kojoj je nivo 71 m dok je koeficijent propusnosti rečnog dna 10^{-5} s⁻¹. Stoga na ovom delu granice zadajemo Robinov granični uslov (2.53) pri čemu su $g_{\rm R} = 71$ m i $\Psi = 10^{-5}$ s⁻¹. Neka se tri bunara nalaze na pozicijama (0,100 m), (400 m,100 m) i (800 m,100 m). Kapacitet centralnog bunara je 80 litara u sekundi, a kapaciteti druga dva su po 40 l/s. Bunare modeliramo preko terma izvora i ponora q. Poznato je da 90% vode u bunare dolazi iz reke dok ostatak vode dolazi iz zaleđa, pa prema tome na delu granice y = 500 m postavljamo Nojmanov granični uslov (2.51) pri čemu je $g_{\rm N} = -0.016/800$ m/s. Na delu granice x = 0 i x = 800 m zadat je Nojmanov granični uslov $g_{\rm N} = 0$.



Slika 7.9: Skica modela u Primeru 13.

Na lokaciji (400 m, 460 m) brzinom 5 l/s izliva se voda sa koncentracijom zagađivača 1 g/s tokom prvih 10 dana, nakon čega izlivanje prestaje. Zbog moguće nestabilnosti numeričkog rešenja advektivno-difuzne jednačine [59] potrebno je na granici prilivanja vode u model postaviti Dirihleov ili Robinov granični uslov, a na granici odlivanja vode iz modela Nojmanov granični uslov. Budući da je disperzija posledica advekcije na zanemarenim skalama njome se rastvorena materija može prostirati samo u smeru od višeg hidrauličkog potencijala ka nižem (u smeru osnovnog toka). Međutim, budući da je disperzija modelirana difuznim termom, jednačina (4.1) dopušta da se rastvorena materija prostire u suprotnom smeru čak i kada je difuzivnost jednaka nuli što je nefizičko ponašanje. Da rastvorena materija koja se na ovaj način (suprotno fizici) kreće uzvodno ne bi izlazila iz domena, na granicama priliva vode u model y = 0 i y = 500 m zadajemo Robinov uslov sa $\Psi^C = 10^{-10}$ m/s i $g_R^C = 0$. Na ostalim granicama zadajemo Nojmanov granični uslov $g_N^C = 0$. Rastvorena materija napušta model kroz bunar.

Neka je tenzor filtracije $\mathbb{K} = 6 \cdot 10^{-4} \mathbb{I}$ m/s, difuzivnost $D_{\rm d} = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, longitudalna disperzivnost $\alpha_{\rm L} = 36$ m, transferzalna disperzivnost $\alpha_{\rm T} = 3.6$ m, poroznost $\varepsilon = 0.2$. Pretpostavlja se da su u svakom trenutku koncentracije u vodi i u čvrstoj fazi u ravnoteži. Odnos koncentracije u čvrstoj i tečnoj fazi opisan je parametrom b = 10. Period poluraspada zagađivača u obe faze jednak je $t_{1/2} = 60$ dana.



Slika 7.10: Koncentracija u središnjem bunaru u odnosu na vremensku osu u danima u Primeru 13.

Na Slici 7.10 prikazana je koncentracija izmerena u središnjem bunaru. Sa ove slike vidimo da sorpcija usporava kretanje zagađenja.

Primer 15. Ovaj primer je predstavljen u radu [43]. Rešavana je jednodimenzionalna jednačina (2.38) u prostornom domenu $z \in (0, 0.6)$ i vremenu $t \in (0, 302.76]$. Diskretizacija prostornog domena je izvršena sa 180 tačaka kolokacije. Na delu granice z = 0 zadat je Nojmanov granični uslov $g_N = 0$, dok je na delu granice z = 0.6zadat Dirihleov granični uslov $g_D = 1$. Početno rešenje je dato sa $h_0 = -10$.

Neka je koeficijent filtracije $K = 9.2 \cdot 10^{-5}$, poroznost $\varepsilon = 0.368$ i neka su parametri Mualem–van Genuhtenovog modela a = 3.55, n = 2, $s_{\rm s} = 1$, $s_{\rm r} = 0.27717$. Za usrednjavanje realativne propusnosti je iskorišćen metod (3.176).

Sabiranjem grešaka u balansu (6.18) u svim ćelijama i svim vremenskim trenucima dobijamo ukupnu grešku u balansu. Relativnu grešku u balansu dobijamo kada ukupnu grešku podelimo sa većom od vrednosti ukupnog uticaja ili ukupnog isticaja iz modela.

Tabela 7.26: Relativna greška u balansu u zavisnosti od načina rešavanja nelinearnog sistema u Primeru 15 (jednodimenzionalni slučaj).

Pikarova metoda	Modifikovana Pikarova metoda	Njutnova metoda
0.52	3.99e-11	1.78e-10

Rezultati predstavljeni u Tabeli 7.26 pokazuju da Pikarova metoda ima veliku relativnu grešku u balansu, dok je kod modifikovane Pikarove metode i Njutnove metode ta greška zanemarljivo mala.

Ovakav problem rešavan je i u trodimenzionalnom slučaju kada je domen kocka stranice 0.6. U ovom slučaju iako je diskretizacija znatno grublja nego u [43] dobijeno je slično prostiranje fronta količine vode θ (Slika 7.11).



Glava 8

Zaključak

Klasična metoda konačnih zapremina (linearna TPFA shema) za diskretizaciju difuznog terma je drugog reda tačnosti samo ukoliko mreža poštuje princip ortogonalnosti u odnosu na tenzor, što je uslov koji je teško a ponekad čak i nemoguće ispuniti. Pored ove sheme, u disertaciji su predstavljene i linearna MPFA shema, nelinearna TPFA shema i nelinearna MPFA shema koje su drugog reda tačnosti u anizotropnim poroznim sredinama i na nestrukturnim mrežama. Pri tome linearna MPFA shema ne zadovoljava princip maksimuma i minimuma, nelinearna TPFA shema poštuje pozitivnost rešenja (što možemo posmatrati kao globalni princip minimuma) i nelinearna MPFA shema zadovoljava princip maksimuma i minimuma.

Diskretizaciju fluksa na stranama gde postoji diskontinuitet u tenzoru filtracije je u opštrem slučaju nemoguće konstruisati korišćenjem samo vrednosti hidrauličkog potencijala u primarnim tačkama kolokacije (težišta ćelija) i u stranama. Tada je potrebno rekonstruisati vrednost hidrauličkog potencijala u ivicama ili čvorovima. U radu [66] ove vrednsoti se dobijaju interpolacijom koristeći lokalnu koordinatnu transformaciju. Direktna aproksimacija fluksa koja koristi istu ovu koordinatnu transformaciju uvedena je u [69] i izložena ovde u poglavlju 3.3. Ovakav pristup ne narušava red tačnosti metode kao ni princip maksimuma i minimuma.

Hidraulički potencijal se u okolini bunara ponaša logaritamski i njegov gradijent se brzo menja. Stoga, numeričke metode zasnovane na linearnoj aproksimaciji daju netačan proticaj u bunaru i netačan hidraulički potencijal u okolini bunara. Kada strujanje u modelu uglavnom zavisi od prisustva bunara, netačnost u okolini bunara ima za posledicu gubljenje tačnosti u celom domenu. U poglavlju 3.4 izložene su sheme koje su prethodno predstavljene u radovima [26, 27]. Prva shema je slična Pismanovoj korekciji i daje tačniji proticaj u bunaru, ali nije čak ni prvog reda tačnosti za hidraulički potencijal. Drugom shemom dobija se hidraulički potencijal drugog reda tačnosti.

Pored toga u tezi su predstavljene metode za diskretizaciju advektivnog terma, rešavanje sistema nelinearnih jednačina i diskretizaciju evolutivnih jednačina. Ove klasične numeričke metode neophodne su za simulaciju podzemnog toka i transporta mase i energije.

U projektu otvorenog koda W.O.D.A. u ovom trenutku parametri Mualem – van Genuhtenovog modela su konstantni za ceo model. U nastavku istraživanja na modeliranju podzemnog strujanja trebalo bi razviti numeričke metode koje će omogućiti da se ovi parametri menjaju glatko unutar sloja odnosno diskontinualno između slojeva. Takođe je planirana ekstenzija predloženih shema za diskretizaciju u okolini bunara na slučaj heterogene podzemne sredine.

Dodatak A

Ravan materijalnog diskontinuiteta sa normalom \mathbf{n}_i (Slika 3.3) se dovodi u horizontalni položaj koordinatnom tranformacijom

$$[u \quad v \quad w]^{\mathrm{T}} = R_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \qquad (A.1)$$

gde je $R_i = R(\mathbf{n}_i)$ matrica rotacije takva da je

$$R(\mathbf{n})\mathbf{n} = \begin{cases} \mathbf{z} & \text{for } n^z \ge 0, \\ -\mathbf{z} & \text{for } n^z < 0, \end{cases}$$
(A.2)

pri čemu je $\mathbf{n} = [n^x \quad n^y \quad n^z]^T$ jedinični vektor normalan na ravan materijalnog diskontinuiteta i $\mathbf{z} = [0 \quad 0 \quad 1]^T$. Matricu rotacije izračunavamo Rodrigesovom rotacionom formulom sa osom rotacije $\mathbf{n} \times \mathbf{z}$:

$$R(\mathbf{n}) = \begin{bmatrix} \overline{n}^{z} & 0 & 0\\ 0 & \overline{n}^{z} & 0\\ 0 & 0 & \overline{n}^{z} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\overline{n}^{x}\\ 0 & 0 & -\overline{n}^{y}\\ \overline{n}^{x} & \overline{n}^{y} & 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{1 + \overline{n}^{z}} \begin{bmatrix} \overline{n}^{y} \overline{n}^{y} & -\overline{n}^{x} \overline{n}^{y} & 0\\ -\overline{n}^{x} \overline{n}^{y} & \overline{n}^{x} \overline{n}^{x} & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$
(A.3)

gde je $\overline{\mathbf{n}} = \mathbf{n}$ ako je $n^z \ge 0$, odnosno $\overline{\mathbf{n}} = -\mathbf{n}$ ako je $n^z < 0$.

Ovakvom transformacijom svaka tačka na materijalnom diskontinuitet
u $\mathbf{x} \in \overline{U}_i \cap \overline{U}_{i-1}$ će imati istu treću koordinat
u $w = w_i$. Posmatrajmo za početak samo pozitivno
 i (Slika 3.3).

Neka je

$$[\mu \ \nu \ \xi]^{\mathrm{T}} = R_i \mathbf{G}_{i-1} \quad i \quad [\mu_1 \ \nu_1 \ \xi_1]^{\mathrm{T}} = R_i \mathbf{G}_i.$$
(A.4)

Uslov (3.77) možemo zapisati kao

$$h_{i-1} + \begin{bmatrix} \mu & \nu & \xi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w_i \end{bmatrix} = h_i + \begin{bmatrix} \mu_1 & \nu_1 & \xi_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w_i \end{bmatrix}, \quad \text{za svako } u \text{ i } v. \quad (A.5)$$

114

Da bi prethodni uslov važio za svako u i v neophodno je da bude $\mu = \mu_1, \nu = \nu_1$, pa se uslov (3.77) svodi na

$$h_{i-1} + \xi w_i = h_i + \xi_1 w_i. \tag{A.6}$$

Matrica rotacije $R(\mathbf{b})$ je ortogonalna, pa je

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = -\mathbf{n}^{\mathrm{T}} \mathbb{K} \mathbf{G} = -\mathbf{n}^{\mathrm{T}} \mathbb{K} \left(R(\mathbf{n}) \right)^{\mathrm{T}} R(\mathbf{n}) \mathbf{G} = -\boldsymbol{\tau} \cdot \left(R(\mathbf{n}) \mathbf{G} \right), \qquad (A.7)$$

gde je

$$\boldsymbol{\tau} = R(\mathbf{n})\mathbb{K}\mathbf{n} = \begin{bmatrix} \tau^x & \tau^y & \tau^z \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}.$$
 (A.8)

Ako označimo $\boldsymbol{\tau}_{i,j} = R_i \mathbb{K}_j \mathbf{n}_i$, uslov (3.78) možemo zapisati

$$-\begin{bmatrix}\tau_{i,i-1}^{x} & \tau_{i,i-1}^{y} & \tau_{i,i-1}^{z}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mu\\\nu\\\xi\end{bmatrix} = -\begin{bmatrix}\tau_{i,i}^{x} & \tau_{i,i}^{y} & \tau_{i,i}^{z}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mu\\\nu\\\xi_{1}\end{bmatrix}.$$
 (A.9)

Rešavanjem po ξ_1 dobijamo

$$\xi_1 = \frac{\tau_{i,i-1}^x - \tau_{i,i}^x}{\tau_{i,i}^z} \mu + \frac{\tau_{i,i-1}^y - \tau_{i,i}^y}{\tau_{i,i}^z} \nu + \frac{\tau_{i,i-1}^z}{\tau_{i,i}^z} \xi.$$
 (A.10)

Poslednja jednačina nam daje $R_i \mathbf{G}_i$ preko $R_i \mathbf{G}_{i-1}$, što možemo matrično zapisati kao

$$R_{i}\mathbf{G}_{i} = \Psi_{i}R_{i}\mathbf{G}_{i-1}, \quad \Psi_{i} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varphi_{i}^{x} & -\varphi_{i}^{y} & 1 - \varphi_{i}^{z} \end{bmatrix}, \quad (A.11)$$

gde je

$$\boldsymbol{\varphi}_{i} = \begin{bmatrix} \varphi_{i}^{x} & \varphi_{i}^{y} & \varphi_{i}^{z} \end{bmatrix}^{T} = \frac{1}{\tau_{i,i}^{z}} (\boldsymbol{\tau}_{i,i} - \boldsymbol{\tau}_{i,i-1}), \qquad (A.12)$$

Zapišimo (A.11) u obliku

$$\mathbf{G}_i = M_i \mathbf{G}_{i-1}, \quad \text{gde je} \quad M_i = R_i^{-1} \Psi_i R_i. \tag{A.13}$$

Vrednost \mathbf{G}_i u bilo kom sloju $\Omega_i, i > 0$, možemo predstaviti preko \mathbf{G}_0 :

$$\mathbf{G}_i = N_i \mathbf{G}_0, \quad \text{gde je} \quad N_i = M_i N_{i-1} \quad \text{i} \quad N_0 = \mathbb{I}.$$
 (A.14)

Uslov (A.6) na osnovu (A.10) i (A.12) možemo zapisati

$$h_i = h_{i-1} + w_i(\xi - \xi_1) = h_{i-1} + w_i \boldsymbol{\varphi}_i \cdot [\mu \quad \nu \quad \xi]^{\mathrm{T}},$$
 (A.15)

115

odnosno

$$h_i = h_{i-1} + \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G}_{i-1}, \quad \text{gde je} \quad \mathbf{a}_i = w_i R_i^{-1} \boldsymbol{\varphi}_i.$$
 (A.16)

Na osnovu (A.14) ovu formulu možemo napisati kao

$$h_i = h_0 + \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{G}_0, \quad \text{gde je} \quad \boldsymbol{\eta}_i = \sum_{j=1}^i N_{j-1} \mathbf{a}_j.$$
 (A.17)

Slično, kada je *i* negativno (Slika 3.3) svaka tačka na materijalnom diskontinuitetu $\mathbf{x} \in \overline{U}_i \cap \overline{U}_{i+1}$ ima istu treću koordinatom u novom sistemu $w = w_i$. Ponavljajući isti postupak kao i za pozitivno *i* umesto (A.11) dobijamo

$$R_i \mathbf{G}_i = \Psi_i R_i \mathbf{G}_{i+1}, \tag{A.18}$$

pri čemu umesto (A.12) imamo

$$\boldsymbol{\varphi}_i = \frac{1}{\tau_{i,i}^z} (\boldsymbol{\tau}_{i,i} - \boldsymbol{\tau}_{i,i+1}). \tag{A.19}$$

Nastavljajući proces izvođenja kao za pozitivno idobijamo

$$\mathbf{G}_i = M_i \mathbf{G}_{i+1}, \quad M_i = R_i^{-1} \Psi_i R_i, \tag{A.20}$$

$$\mathbf{G}_i = N_i \mathbf{G}_0, \quad N_i = M_i N_{i+1}, \quad N_0 = \mathbb{I},$$
(A.21)

$$h_i = h_{i+1} + \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G}_{i+1}, \quad \mathbf{a}_i = w_i R_i^{-1} \boldsymbol{\varphi}_i, \tag{A.22}$$

$$h_i = h_0 + \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{G}_0, \quad \boldsymbol{\eta}_i = \sum_{j=i}^{-1} N_{j+1} \mathbf{a}_j.$$
 (A.23)

Ako tačka $\mathbf{x} \in \overline{U}_i$, primenom (A.17), (A.23) i (A.14) u jednačini (3.76) dobijamo (3.79), pri čemu je

$$F(\mathbf{x}) = \left(\boldsymbol{\eta}_i + N_i^{\mathrm{T}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)\right)$$
(A.24)

Dodatak B

Neka je prav kružni cilindar dat svojom osom p i poluprečnikom r. Lambertova cilindrična projekcija neke tačke \mathbf{x} na cilindar je definisana kao

$$\Pr(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_p + r \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_p}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_p\|},\tag{B.1}$$

gde je \mathbf{x}_p ortogonalna projekcija tačke \mathbf{x} na osu cilindra p.



Slika B.1: Lambertova cilindrična projekcija.

Ovako definisana projekcija prave u opštem slučaju nije kriva drugog reda (slika B.1). Površinu $|\Pr(f)|$ je moguće naći primenom neke od metoda numeričke integracije.

Literatura

- I. Aavatsmark. An introduction to multipoint flux approximation for quadrilateral grids. *Comput. Geosci.*, 6(3–4):405–432, 2002.
- [2] I. Aavatsmark, G. Eigestad, B. Mallison, and J. Nordbotten. A compact multipoint flux approximation method with improved robustness. *Numer. Meth. Partial Diff. Equations*, 24(5):1329–1360, 2008.
- [3] D.L. Baker. Some analytical and approximate Darcian means. Ground Water, 37(4):532–538, 1999.
- [4] D.L. Baker. General validity of conductivity means in unsaturated flow models.
 J. Hydrol. Eng., 11(6):526-538, 2006.
- [5] T.J. Barth and D.C. Jespersen. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. AIAA Paper 89-0366, 1989.
- [6] J. Bear. Dynamics of Fluids in Porous Media. American Elsevier publishing company, New York, 1972.
- [7] J. Bear, C. Braester, and P.C. Menier. Effective and relative permeabilities of anisotropic porous media. *Transport Porous Med.*, 2(3):301–316, 1987.
- [8] J. Bear and A. H.-D. Cheng. Modeling groundwater flow and contaminant transport. Springer Dordrecht, Heidelberg, London, New York, 2010.
- [9] A. Berman and R. J. Plemmons. Nonnegative Matrices in the Mathematical Sciences. SIAM, Philadelphia, 1994.

- [10] BioIrc and Institute for Development of Water Resources "Jaroslav Černi". Lizza – pre- and post-processor for modeling of underground water flow with Ranney wells. http://www.bioirc.ac.rs/index.php/ groundwater-flow-software. Accessed: 2014-11-24.
- [11] B. Borevsky, L. Yazvin, and J. Margat. Importance of groundwater for water supply. In *Groundwater Resources of the World and Their Use*, volume 6, pages 20–24, Paris, France, 2004. Unesco.
- [12] H.R. Brooks and A.T. Corey. Hydraulic properties of porous media. Hydrology papers 3, Collorado state university, Fort Collins, CO, 1964.
- [13] M. Celia, E.T. Bouloutas, and R.L. Zarba. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resour. Res.*, 26(7):1483– 1496, 1990.
- [14] Z. Chen and Y. Zhang. Well flow models for various numerical methods. Int. J. Numer. Anal. Mod., 6(3):375–388, 2009.
- [15] P. G. Ciarlet. Discrete maximum principle for finite-difference operators. Aequationes Math., 4:338–352, 1970.
- [16] R. Courant, K.O. Friedrichs, and H. Lewy. Über die partiellen Differenzgleichungen der Mathematischen Physik. *Mathematische Annalen*, 100:32–74, 1928.
- [17] E. L. Cussler. Diffusion: mass transfer in fluid systems. Cambridge university press, 2009.
- [18] A.A. Danilov and Yu.V. Vassilevski. A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations on conformal polyhedral meshes. *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 24(3):207–227, 2009.
- [19] M. Delanaye. Polynomial reconstruction finite volume schemes for the compressible Euler and Navier-Stokes equations on unstructured adaptive grids. PhD thesis, University of Liege, Belgium, September 1996.

- [20] M. Dimkić, H.J. Brauch, and M. Kavanaugh. Groundwater management in large river basins. IWA publishing, London, 2008.
- [21] M. Dimkić, M. Pušić, D. Vidović, N. Filipović, V. Isailović, and B. Majkić. Numerical model assessment of radial-well aging. ASCE's Journal of computing in civil engineering, 25(1):43–49, 2011.
- [22] M. Dimkić, M. Pušić, D. Vidović, D. Đurić, and Đ. Boreli-Zdravković. Analiza transporta zagađenja kod određivanja zona sanitarne zaštite izvorišta podzemnih voda. *Vodoprivreda*, 45(4–6):203–218, 2013.
- [23] Yu Ding and L. Jeannin. A new methodology for singular modeling in flow simulations in reservoir engineering. *Computat. Geosci.*, 5(2):93–119, 2001.
- [24] Yu Ding and L. Jeannin. New numerical schemes for near well modeling using flexible grids. SPE J., 9(1):109–121, 2004.
- [25] P. Döll and S. Siebert. Global modeling of irrigation water requirements. Water Resour. Res., 38(4):8–1, 2002.
- [26] M. Dotlić. Finite volume methods for well-driven flows in anisotropic porous media. CMAM, 14(4):473–483, 2014.
- [27] M. Dotlić, D. Vidović, B. Pokorni, M. Pušić, and M. Dimkić. Second-order accurate finite volume method for well-driven flows. arXiv preprint arXiv:1312.2388, 2015. prhvaćen uz izmene u J. Comp. Phys.
- [28] J. Droniou. Finite volume schemes for diffusion equations: introduction to and review of modern methods. Math. Mod. Meth. Appl. Sci., 24(8):1575–1619, 2014.
- [29] J. Droniou and C. Le Potier. Construction and convergence study of schemes preserving the elliptic local maximum principle. SIAM J. Numer. Anal., 49(2):459–490, 2011.
- [30] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. Handbook of Numerical Analysis, 7:713–1018, 2000.

- [31] R. Eymard, M. Gutnic, and D. Hilhorst. The finite volume method for Richards equation. *Comput. Geosci.*, 3(3-4):259–294, 1999.
- [32] M. Fiedler. Special matrices and their applications in numerical mathematics. Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1986.
- [33] R. A. Freeze and J. A. Cherry. *Groundwater*. Prentice-Hall, 1977.
- [34] Z. Gao and J. Wu. A small stencil and extremum-preserving scheme for anisotropic diffusion problems on arbitrary 2D and 3D meshes. J. Comp. Phys., 250:308–331, 2013.
- [35] W.R. Gardner. Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. Soil Sci., 85(4):228–232, 1958.
- [36] C. Geuzaine and J.-F. Remacle. Gmsh: A 3-d finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. Int. J. Numer. Meth. Eng, 79(11):1309–1331, 2009.
- [37] S.K. Godunov. A finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Mat. Sbornik*, 47:271–306, 1959.
- [38] M.K. Hubbert. Darcy's law and the field equations of the flow of underground fluids. Trans. Am. Inst. Min. Metall. Eng., 207:222–239, 1956.
- [39] B.S. Jovanović. Numeričke metode rešavanja parcijalnih diferencijalnih jednačina, volume 8 of Savremena računska tehnika i njena primena. Mat. Institut, Beograd, 1989.
- [40] B.S. Jovanović and E. Süli. Analysis of Finite Difference Schemes for Linear Partial Differential Equations with Generalized Solutions, volume 46 of Springer Series in Computational Mathematics. Springer, London, 2014.
- [41] V. J. Katz. The history of Stokes' theorem. Mathematics Magazine, 52(3):146– 156, 1979.

- [42] E. Keilegavlen, J.M. Nordbotten, and I. Aavatsmark. Sufficient criteria are neccessary for monotone control volume methods. *Appl. Math. Lett.*, 22:1178– 1180, 2009.
- [43] K. Krabbenhøft. An alternative to primary variable switching in saturatedunsaturated flow computations. Adv. Water Resour., 30:483–492, 2007.
- [44] O.A. Ladyženskaja, V.A. Solonnikov, and N.N. Ural'ceva. Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type, volume 23 of Translations of Mathematical Monographs. American Mathematical Soc., 1968.
- [45] C. Le Potier. Schéma volumes finis monotone pour des opérateurs de diffusions fortement anisotropes sur des maillages de triangle non structurés. C.R. Math. Acad. Sci. Paris, 341:787–792, 2005.
- [46] C. Le Potier. A nonlinear finite volume scheme satisfying maximum and minimum principles for diffusion operators. Int. J. Finite Vol., 6(2):1–20, 2009.
- [47] K. Lipnikov, M. Shashkov, D. Svyatskiy, and Yu. Vassilevski. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on unstructured triangular and shaperegular polygonal meshes. J. Comp. Phys., 227(1):492–512, 2007.
- [48] K. Lipnikov, D. Svyatskiy, and Yu. Vassilevski. Interpolation-free monotone finite volume method for diffusion equations on polygonal meshes. J. Comp. Phys., 228(3):703–716, 2009.
- [49] K. Lipnikov, D. Svyatskiy, and Yu. Vassilevski. Minimal stencil finite volume scheme with the discrete maximum principle. *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 27(4):369–385, 2012.
- [50] N. Milojević. *Hidrogeologija*. Zavod za izdavanje udžbenika, Beograd, 1968.
- [51] C. Moore and J. Doherty. Role of the calibration process in reducing model predictive error. Water Resour. Res., 41(5), 2005.
- [52] Y. Mualem. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. Water Resour. Res., 12(3):513–522, 1976.

- [53] S. S. Mundal, E. Keilegavlen, and I. Aavatsmark. Simulation of anisotropic heterogeneous near-well flow using MPFA methods on flexible grids. *Computat. Geosci.*, 14(4):509–525, 2010.
- [54] K. Nikitin. A monotone nonlinear finite volume method for advection-diffusion equations on unstructured polyhedral meshes in 3d. Russ. J. Numer. Anal. Math. Model., 25(4):335–358, 2010.
- [55] L.E. Payne. Improperly Posed Problems in Partial Differential Equations. SIAM, 1975.
- [56] D.W. Peaceman. Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation. SPE J., 18(3):183–194, 1978.
- [57] D.W. Peaceman. Interpretation of wellblock pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability. SPE J., 23(3):531–543, 1983.
- [58] M. Pušić, M. Dimkić, D. Vidović, M. Dotlić, and I. Oparušić. Analiza uticaja nekih hidroloških parametara na početni kapacitet bunara sa horizontalnim drenovima. *Vodoprivreda*, 44(4-6):175–180, 2012.
- [59] H.-G. Roos, M. Stynes, and L. Tobiska. Numerical Methods for Singularly Perturbed Differential Equations. Springer, Berlin, 1996.
- [60] D. Schulze-Makuch. Longitudinal dispersivity data and implications for scaling behavior. *Ground Water*, 43(3):443–456, 2005.
- [61] A. Szymkiewicz. Approximation of internodal conductivities in numerical simulation of one-dimensional infiltration, drainage and capillary rise in unsaturated soils. *Water Resour. Res.*, 45, W10403, 2009.
- [62] M. Th. van Genuchten. A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Sci. Soc. Am. J., 44(5):892–898, 1980.
- [63] V. Venkatakrishnan. Convergence to steady state solutions of the Euler equations on unstructured grids with limiters. J. Comp. Phys., 118:120–130, 1995.

- [64] D. Vidović, M. Dimkić, and M. Pušić. Accelerated non-linear finite volume method for diffusion. J. Comp. Phys., 230(7):2722–2735, 2011.
- [65] D. Vidović, M. Dotlić, M. Dimkić, and M. Pušić. Tabulation of saturation models. In Proceedings of the XIX International Conference on Computational Methods in Water Resources, pages 1–5, Urbana, Illinois, 2012.
- [66] D. Vidović, M. Dotlić, M. Dimkić, M. Pušić, and B. Pokorni. Convex combinations for diffusion schemes. J. Comp. Phys., 246:11–27, 2013.
- [67] D. Vidović, M. Dotlić, and B. Pokorni. W.O.D.A solver. http://www. sourceforge.net/projects/wodasolver/.
- [68] D. Vidović, M. Dotlić, B. Pokorni, M. Pušić, and M. Dimkić. Using pest for drainage optimization. Water Research and Managment, 4(2):1–4, 2014.
- [69] D. Vidović, M. Dotlić, M. Pušić, and B. Pokorni. Piecewise linear transformation in diffusive flux discretization. J. Comp. Phys., 282:227–237, 2015.
- [70] A. Yuan and Z. Sheng. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on polygonal meshes. J. Comp. Phys., 227(12):6288–6312, 2008.

Biografija

Milan D. Dotlić je rođen 1984. godine u Kraljevu, gde je završio Osnovnu školu "Četvrti kraljevački bataljon" i Elektro-saobraćajno-tehničku školu "Nikola Tesla". Na Matematičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu, odsek za numeričku matematiku i optimizaciju, diplomirao je 2009. godine. Master tezu pod nazivom *Konstrukcija interpolacionih talasića za rešavanje običnih diferencijalnih jednačina*, pod mentorstvom prof. dr Desanke Radunović odbranio je 2010. godine, čime je stekao zvanje Diplomirani matematičar - master. Doktorske studije Matematičkog fakulteta u Beogradu upisao je 2009. godine.

Skolske 2009/2010 godine predaje matematiku u Geološko-hidrometereološkoj školi "Milutin Milanković" u Beogradu i informatiku u Osnovnoj školi "Milan Đ. Milićević". U zvanju istraživač-saradnik radi u Institutu za vodoprivredu "Jaroslav Černi" u Beogradu od 2010. godine. Angažovan je na projektu tehnološkog razvoja Ministarstva prosvete i nauke Republike Srbije TR37014.

U naučnim časopisima objavio je sledeće radove:

- Vidović D., Dotlić M., Pušić M., Pokorni B., Dimkić M., Piecewise linear transformation in diffusive flux discretization, *J. Comp. Phys.*, Vol. 282, pp. 227–237, 2015.
- Dotlić M., Finite Volume Methods for Well-Driven Flows in Anisotropic Porous Media, *CMAM*, Vol. 14, No. 4, pp. 473–483, 2014.
- Vidović D., Dotlić M., Pokorni B., Pušić M., Dimkić M., Using PEST for Drainage Optimization, Water Research and Management, Vol. 4, No. 2, pp. 15–17, 2014.

- Vidović D., Dotlić M., Pokorni B., Pušić M., Dimkić M., Simulating Unsaturated Flow With a Finite Volume Method, Water Research and Management, Vol. 4, No. 1, pp. 23–30, 2014.
- Vidović D., Dotlić M., Dimkić M., Pušić M., Pokorni B., Convex combinations for diffusion schemes, *J. Comp. Phys.*, Vol. 246, pp. 11–27, 2013.
- Pušić M., Dimkić M., Vidović D., Dotlić M., Oparušić I., Analiza uticaja nekih hidrogeoloških parametara na početni kapacitet bunara sa horizontalnim drenovima, *Vodoprivreda*, broj 258–260, Vol. 44, No. 4–6/2012, Beograd, pp. 175–180, 2012.

U procesu recenzije nalazi se rad:

• Dotlić M., Vidović D., Pokorni B., Pušić M., Dimkić M. Second-order accurate finite volume method for well-driven flows, *J. Comp. Phys.*

Učestvovao je na sledećim međunarodnim konferencijama:

- Vidović D., Dotlić M., Pokorni B., Pušić M., Dimkić M. Piecewise Linear Transformation in Diffusive Flux Discretizations, *Finite Volumes for Complex Applications VII - Elliptic, Parabolic and Hyperbolic Problems - FVCA 7, Berlin, June 2014,* Series: Springer Proceedings in Mathematics and Statistics, Vol. 78, Eds: Fuhrmann J., Ohlberger M., Rohde C.; Springer, pp. 723–730, 2014.
- Dotlić M., Ignjatović M., Vidović D., Pokorni B., Pušić M. Nelinearna metoda konačnih zapremina, *Third Mathematical Conference of the Republic of Srpska, Volume 1, 07–08 June 2013*, Trebinje, University of East Sarajevo, Mathematical Society of the Republic of Srpska, pp. 189–200, 2014.
- Vidović D., Dotlić M., Dimkić M., Pušić M. Tabulation of saturation models, XIX International Conference on Water Resources, 17–21 June 2012, University of Illinois at Urbana-Champaign.

- Vidović D., Dotlić M., Pušić M. Computing Well-Driven Groundwater Flow with a Finite Volume Method, *IWA Specialist Groundwater Conference*, 08-10 September 2011, Beograd, pp. 193–197, 2011.
- Dotlić M., Vidović D., Dimkić M., Pušić M., Radanović J. Finite Volume Method for Well-Driven Groundwater Flow, *Finite Volumes for Complex Applications VI – Problems and Perspectives, Volume 1, 6–10 June 2011*, Prague, Springer Proceedings in Mathematics 4, pp. 361–368, 2011.

Jedan je od autora projekta otvorenog koda W.O.D.A. 1 za simulaciju podzemnog strujanja.

 $^{^{1}} http://sourceforge.net/projects/wodasolver/$

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани: Милан Дотлић

Број уписа: 2008/2009

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Прорачун подземног тока методом коначних запремина

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

Потпис докторанда

Musay Lowent

У Београду, 11.03.2015.

Прилог 2.

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора: Милан Дотлић

Број уписа: <u>2008/2009</u>

Студијски програм: Математика

Наслов рада: Прорачун подземног тока методом коначних запремина

Ментор: проф. др Бошко Јовановић

Потписани: Милан Дотлић

изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу **Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду.**

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

Потпис докторанда

У Београду, 11.03.2015.

Munay 20th mt

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку "Светозар Марковић" да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Прорачун подземног тока методом коначних запремина

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.



- 2. Ауторство некомерцијално
- 3. Ауторство некомерцијално без прераде
- 4. Ауторство некомерцијално делити под истим условима
- 5. Ауторство без прераде
- 6. Ауторство делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

Потпис докторанда

У Београду, 11.03.2015.

Muncus 20th, wit

1. Ауторство - Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.

2. Ауторство – некомерцијално. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.

3. Ауторство - некомерцијално – без прераде. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.

4. Ауторство - некомерцијално – делити под истим условима. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.

5. Ауторство – без прераде. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.

6. Ауторство - делити под истим условима. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.