Richards' equation and DEAL II library

Jan Březina

Technical University of Liberec

PANM, 2010

Motivace - přímé aplikace

Koloběh vody v půdě:

- malý rozměr (cm až jednotky m)
- simulace laboratorních experimentů
- heterogenní vzorky
- detailní informace, miliony elementů
- T. Vogel a spol., stavební fakulta, Praha

Proudění podzemní vody v rozsáhlých oblastech:

- velký rozměr (až desítky kilometrů)
- zachycení vývoje volné hladiny
- nedostatek informací
- slabě heterogenní model
- ARTEC, fakulta mechatroniky, Liberec

Richardsova rovnice

$$\frac{\partial \theta(h)}{\partial t} + \mathrm{div}(\boldsymbol{v}) = f$$
$$\boldsymbol{v} = \mathbb{K}(h)(\nabla h - \boldsymbol{g})$$

h - tlaková výška
$\boldsymbol{v}$ - Darcyovská rychlost, makroskopická rychlost tekutiny
$\boldsymbol{g}$ - směrový vektor gravitečního zrychlení
f - objemový zdroj
Parabolicko - eliptické rovnice.

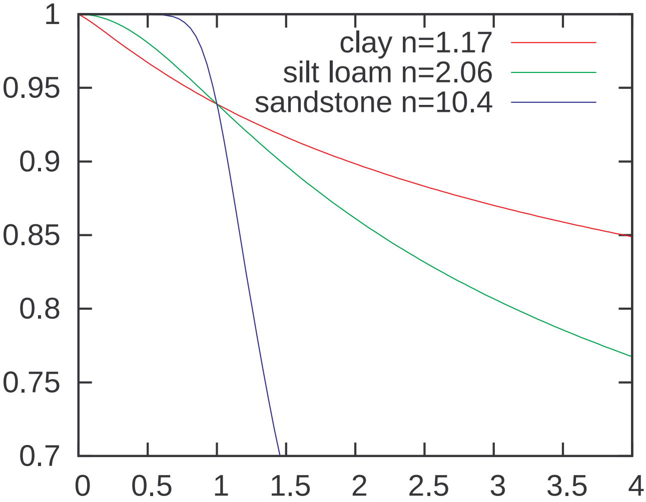
Hydraulické charakteristiky - saturace θ

- Lineární přeškálování primární funkce $\tilde{\theta}$

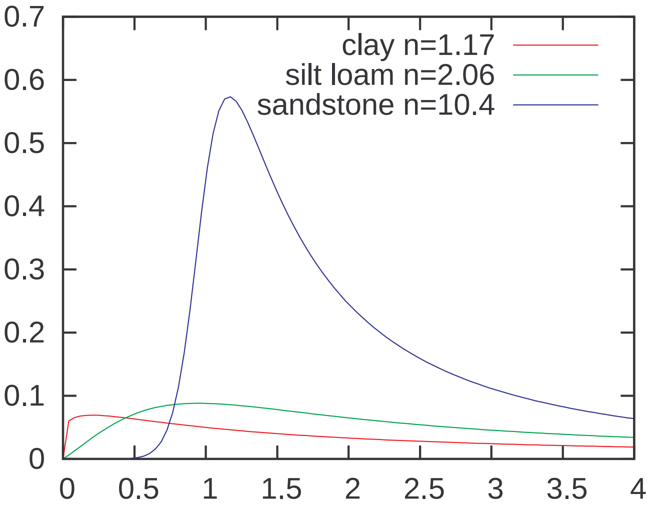
$$\theta(h) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r)\tilde{\theta}(h)$$
$$\tilde{\theta}(h) = (1 + (\alpha h)^n)^{-m}, \quad m = 1 - 1/n$$

- empirická funkce, navržena van Genuchtenem
- Vogel, ořezávání

saturace graf



Hydraulické charakteristiky - kapacita θ'



Hydraulické charakteristiky - tensor vodivosti $\mathbb{K}(h)$

- Anisotropie a heterogenita

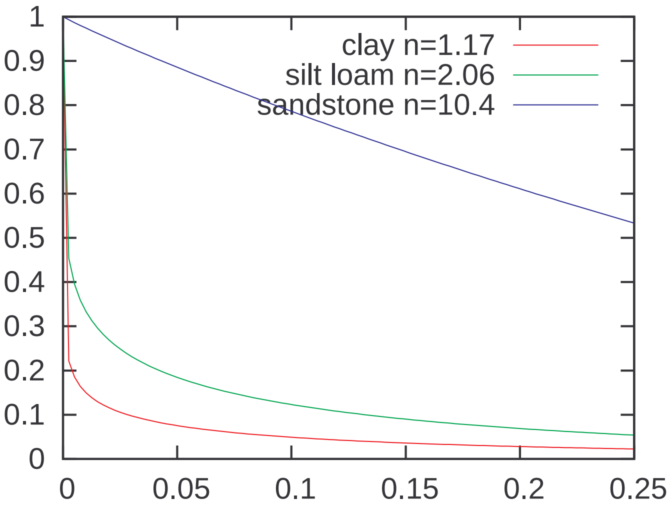
$$\mathbb{K}(h) = \tilde{\mathbb{K}}(x)K(h)$$

- Mualem, kapilární teorie

$$K(h) = K_s\tilde{\theta}^{0.5}\left(\int_0^{\tilde{\theta}} \frac{1}{h(\tilde{\theta})}\right)^2$$

- Genuchten explicitní vzorec
- K_s vodivost při saturaci, řádové rozdíly: písek (10), jíl (10^{-4}), neporušená žula 10^{-7}

vodivost graf



Okrajové podmínky

- Dirichlet, h_D
- Neuman, v_N
- Seepage, kontaktní

$$h(\boldsymbol{v}\cdot)\boldsymbol{n} = 0, \quad h \leq 0, \quad \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n} \geq 0$$

- model deště a odtoku z povrchu nebo kumulace

Smíšená formulace

Přímo testujeme rovnici kontinuity:

$$\int_\Omega \frac{\partial\theta(h)}{\partial t}\varphi + \mathrm{div}\boldsymbol{v}\varphi = \int_\Omega f\varphi, \quad \varphi \in L^2(\Omega)$$

Per-partes v předpisu pro rychlost:

$$\int_\Omega \boldsymbol{\psi}\mathbb{K}^{-1}(h)\boldsymbol{v} - \mathrm{div}\boldsymbol{\psi}(h+z) = -\int_{\partial\Omega}(h_D+z)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\psi},$$

$$\boldsymbol{\psi} \in H(div,\Omega), \quad \boldsymbol{\psi}\cdot\boldsymbol{n} = 0 \text{ na Neumanovské hranici}$$

Aproximace

- Rotheho metoda
- zpětná diference, implicitní schéma
- h - nespojité Q_k prvky řádu k
- $\boldsymbol{v}$ - konformní RT_k prvky, normálové stopy jsou Q_k

Lineární systém

$$\mathbb{A}(h)\boldsymbol{v} + \mathbb{B}^t h = g(h_D, q_N)$$
$$\mathbb{B}\boldsymbol{v} - \mathbb{D}(h)h = f$$

- Iterace v tomto tvaru - Pickardovy iterace
- Schur complement, eliminace rychlosti $\Rightarrow$ nelineární rovnice pro tlak h.
- Odvození Newtonovy metody vede na podobný systém s přidanou nesymetrickou částí a modifikovanou pravou stranou.

Síť

geometrie

- dimenze sítě a dimenze prostoru - nezávislé, template parametr
- referenční elementy pouze hyperkrychle
- h - adaptivita, “hanging nodes”
- různé nástroje pro zachycení lineárních podmínek
- snaha o jednotnou orientaci stěn a hran, netriviální přečíslování při čtení externích sítí

stupně volnosti

- objekt svazující síť a konečné prvky
- p-adaptivita
- pomocí přístupových objektů umožňuje konzistentní přístup na jednotlivých elementech a jejich stěnách
- zpřístupňuje: geometrii
- stupně volnosti na elementu
- hodnoty bázových funkcí a jejich derivací v kvadraturních bodech
- zobrazení na referenční element

konečné prvky

prvky

- skalární, spojité (Lagrange) a nespojité (Legendre), libovolného řádu
- vektorové RT, Nedelec, libovolného řádu
- možno skládat do systému

quadratury

zobrazení na referenční element

- bi/tri - lineární
- vyššího řádu
- prvky s křivou hranicí

Další

- výstupy do několika standardních formátů, VTK
- lineární algebra: vlastní, PETSc, Trilinos, UMFPack
- thready
- dobrá dokumentace

FADBAD++

- automatická diferenciace pomocí templatovaní funkcí
- použito pro derivování hydrologických funkcí
- lze použít pro derivování příspěvků residuálního globálního vektoru, tak vytvořit Jacobiho matici

Příklad aseblačního kódu

```
local_matrix(i,j) +=
  (  phi_i_u * k_inverse_values[q] * phi_j_u * inv_k
    - div_phi_i_u * phi_j_p
    - phi_i_p * div_phi_j_u
    - diff_sat / time.dt() * phi_i_p * phi_j_p
  ) * fe_values.JxW(q);
```

Výsledky

Simulace jednoduché infiltrace.

- oblast 2D, $(0,1) \times (-10,0)$
- poč. podmínka, lineární profil
- okrajové podmínky, nahoře nasyceno $h = 2$, dole sušeno $h = -70$.

závěr, plány

výsledky:

- funkční prototyp programu, ověřen vůči S1D
- demonstrována efektivita vývoje pod DEAL II

plány:

- adaptivita pro nelineární solver
- estimátory chyby
- nelineární solver řízený odhadem chyby
- testy na patologických příkladech
- vhodný iterační řešič, 3D oblast