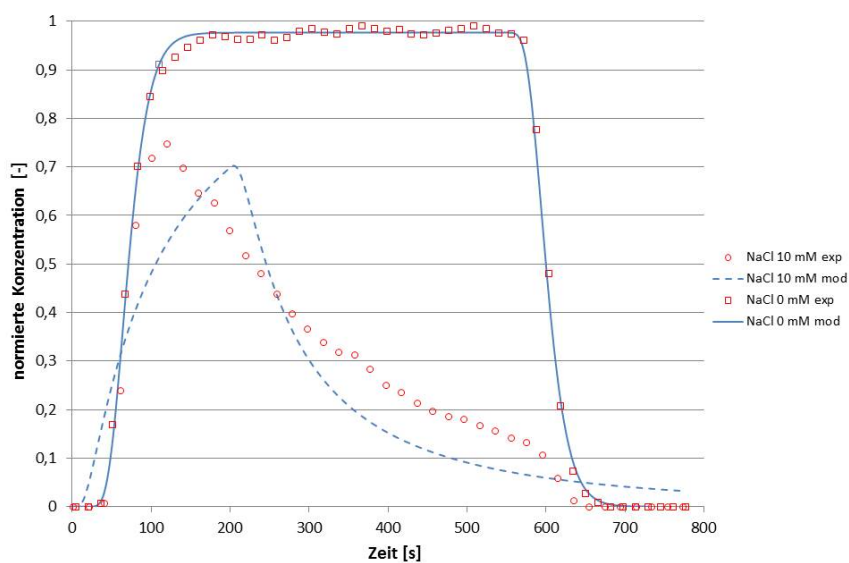


## Ziel

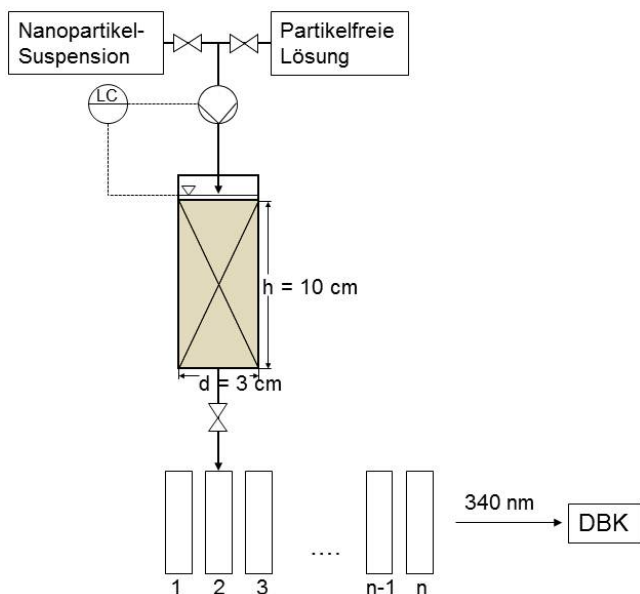
Das Matlab-Programm soll meine experimentellen Daten an die Dispersions-Konvektions-Gleichung (CDE – engl. convection dispersion equation) anpassen.

Die Grafik zeigt die Anpassung der experimentellen Daten an die CDE mittels eines Fortran-Programms (Stanmod). Während die Anpassung der 0 mM NaCl-Werte (Quadrate, durchgezogene Linie) gut funktioniert, kommt das Programm bei 10 mM NaCl (rote Kreise, gestrichelte Linie) an seine Grenzen. Um hier bessere Ergebnisse zu erzielen möchte ich gern ein eigenes Programm schreiben, wobei auch die Möglichkeit bestehen soll, die CDE zu modifizieren, um eine bessere Datenanpassung zu erhalten. Leider sind meine Matlab-Kenntnisse nicht so ausgereift. Deshalb bitte ich hier um Hilfe.



Zum besseren Verständnis des Sachverhaltes habe ich den Versuchsaufbau und die Versuchsbeschreibung mit dargestellt.

## Versuchsaufbau



DBK = Durchbruchkurven = experimentelle Daten bestehend aus Zeit (t) in s und normierter Nanopartikel-Konzentration c (gemessene Konzentration/Ausgangskonzentration)

**Experimentelle Daten:**

**0 mM NaCl**

t in s	c_normiert	stabw
3,76458	0	0,00313
19,52376	0	0,000703652
35,28294	0,007	0,00255
51,04213	0,169	0,01806
66,80131	0,43881	0,01218
82,5605	0,70153	0,00509
98,31968	0,84625	0,01443
114,07886	0,89909	0,0083
129,83805	0,92751	0,00872
145,59723	0,9469	0,00356
161,35641	0,9612	0,00395
177,1156	0,97239	0,00448
192,87478	0,96895	0,00459
208,63396	0,96371	0,000943138
224,39315	0,96292	0,00807
240,15233	0,97215	0,00617
255,91152	0,96225	0,01028
271,6707	0,96773	0,00874
287,42988	0,98013	0,00469
303,18907	0,98651	0,00131
318,94825	0,97909	0,00418
334,70743	0,97463	0,00639
350,46662	0,98605	0,00464
366,2258	0,99139	0,00269
381,98499	0,98533	0,00295
397,74417	0,97998	0,000470702
413,50335	0,98439	0,00125
429,26254	0,97498	0,00345
445,02172	0,97235	0,000822976
460,7809	0,97677	0,0058
476,54009	0,98151	0,00834
492,29927	0,98633	0,00642
508,05845	0,99213	0,01538
523,81764	0,9861	0,01914
539,57682	0,97706	0,01722
555,33601	0,97451	0,01005
571,09519	0,9623	0,00358
586,85437	0,77675	0,00121
602,61356	0,48117	0,01363
618,37274	0,20877	0,01688
634,13192	0,07444	0,00231
649,89111	0,0281	0,00107
665,65029	0,00917	0,000772747
681,40947	0,0011	0,000662487
697,16866	0	0,000251736
712,92784	0	0,000876229
728,68703	0	0,000902601

**10 mM NaCl**

t in s	c_normiert	stabw
0,90751417	0,000379036	0,000536037
20,70751417	0,000725597	0,000954086
40,50751417	0,006964259	0,00463568
60,30751417	0,240125679	0,068358683
80,10751417	0,581330879	0,07938113
99,90751417	0,718731257	0,075171702
119,7075142	0,747489707	0,0705798
139,5075142	0,699187119	0,100259687
159,3075142	0,647458805	0,113070885
179,1075142	0,62729322	0,095977018
198,9075142	0,570317516	0,090868974
218,7075142	0,518276175	0,090123647
238,5075142	0,480789203	0,08469643
258,3075142	0,438226558	0,080682272
278,1075142	0,398803337	0,075949623
297,9075142	0,366752359	0,083059615
317,7075142	0,340028415	0,072547248
337,5075142	0,318318818	0,064985044
357,3075142	0,314282081	0,083015443
377,1075142	0,284238379	0,076690023
396,9075142	0,251233776	0,065160145
416,7075142	0,236192572	0,053188172
436,5075142	0,214409749	0,0399645
456,3075142	0,198117486	0,041988836
476,1075142	0,185553447	0,033719905
495,9075142	0,180650972	0,029819992
515,7075142	0,168810362	0,02489902
535,5075142	0,157342691	0,02303014
555,3075142	0,141401588	0,022608705
575,1075142	0,133321836	0,016740121
594,9075142	0,10741584	0,005767991
614,7075142	0,059110993	0,007184179
634,5075142	0,012861492	0,001282381
654,3075142	0,000738639	0,001044594
674,1075142	0	0
693,9075142	0	0
713,7075142	0	0
733,5075142	0	0
753,3075142	0	0
773,1075142	0	0

744,44621	0	0,000657357
760,20539	0	0,00012641
775,96458	0	0,000039799

### Versuchsbeschreibung:

Vor Versuchsbeginn wird die Säule mit destilliertem Wasser gespült. Zu Beginn wird auf die nanopartikelhaltige Suspension umgeschaltet und diese ca. 520 s auf die Säule gegeben. Anschließend wird wieder auf destilliertes Wasser umgeschaltet und somit die Nanopartikel aus der Säule gespült. Während des Versuches werden am Säulenausgang Proben genommen und in diesen die Nanopartikelkonzentration optisch bestimmt. Diese experimentell ermittelte Durchbruchkurve möchte ich mittels eines Matlab-Programms an die Dispersions-Konvektionsgleichung anpassen.

### Dispersions-Konvektionsgleichung (CDE)

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v \frac{\partial c}{\partial z} - \mu c$$

R = Retardationsfaktor [-]

D = Dispersionskoeffizient [cm<sup>2</sup>/s]

v = Porenwassergeschwindigkeit [cm/s]

c = normierte Konzentration [-]

t = Zeit [s]

μ = Abbaukoeffizient erster Ordnung [1/s]

R und v wurden durch Tracer-Experimente bestimmt: D = 0.0819 cm<sup>2</sup>/s; v = 0.1288 cm/s und während der Datenanpassung vorgegeben und nicht gefittet.

z wurde nicht bestimmt, sondern während des Versuchs konstant gehalten, weil die Proben immer an der gleichen Stelle (am Ausgang) der Säule entnommen wurden.

Hier habe ich die CDE umgestellt, um den PDEPE-Solver von Matlab zu nutzen

Umgestellt:  $R \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} (D \frac{\partial c}{\partial z} - v c) - \mu c$  *z durch x ersetzen*

Matlab-Form:  $c \frac{\partial u}{\partial t} = x^{-m} \frac{\partial}{\partial x} (x^m \cdot f) + s$

c = R

u = c

m = 0

s = -μc

f =  $(D \frac{\partial c}{\partial x} - v c)$

```
function [c,f,s]=DBK(t,x,u,du)
    c=R;
    f=v*u+D*du;
    s=-mi*u;
end
```

*mi entspricht  $\mu$*

```
function u0 = uINIT(x)
```

*hier bin ich überfragt, wie ich  
meine Funktion implementiere*

```
function [pl,ql,pr,qr]=uBC(xl,ul,xr,ur,t)
    pr=v*ur;
    qr=1;
    pl=ul;
    ql=0;
end
```

*Randbedingungen*

### aktuelles Matlab-Programm

```
clear all;
close all;
clc;
%% Global Variables
global t c stabw D R mi v k
%% Daten auslesen
DATA=xlsread('experimentelle und modellierte Daten.xlsx','10 mg
NaCl','A4:C53');
t=DATA(:,1)';
c=DATA(:,2)';
stabw=DATA(:,3)';
%figure
%plot(zeit,c,'-.ro',zeit,stabw,'-.bx');
%%figure
%plot(time,stabw);
%% Initial estimation
D=5.9E-2;
R=9.51E-1;
mi=3.01E-4;
v=0.1288;

k=[D R mi v]

%% FMINSEARCH
Iter=100;
```

```
CDE(k)
disp('running...')
EINSTELLUNG=optimset('TolFun',1e-15,'Tolx',1e-
15,'MaxFunEvals',Iter,'Display','iter');
k=fminsearch('CDE',k,EINSTELLUNG);
disp('Optimized vector k')
k
```

```
function f=CDE(k)
global t c D R mi v
%%k=[D R mi v]
u=pdepe(0,@DBK,@uINIT,@uBC,xmesh,t);
function [c,f,s]=DBK(t,x,u,du)
    c=R;
    f=v*u+D*du;
    s=-mi*u;
figure(1)
plot(zeit,c,'-.ro');
pause(0.2)
f=sum((zeit-c).*(zeit-c));
```