# Popular summary in English

In order to conceptualize and describe real-world processes in natural sciences and engineering, we use *models*—substitute representations of these processes. Models can then be used to communicate and conduct research. Examples of models include reconstructions at smaller scales, like model trains, or larger scales, like molecular models. By developing a *mathematical model* of a process, by "translating it into mathematics", we are able to compactly communicate how the process behaves even where it is difficult or impossible to make measurements in reality.

A mathematical model consists of a list of simplifying assumptions together with a set of mathematical objects that describe the physical laws governing the process. In our context, this amounts to a choice of a one-, two- or three-dimensional space, together with a set of equations. Solutions to these equations can then give both qualitative and quantitative predictions of the process.

It is often the case that model equations cannot be solved by pen-and-paper methods, requiring the use of computational approximations, obtained by so-called *numerical methods*. The use of numerical methods, "feeding the equation into the computer" so-to-speak, involves both computational and theoretical aspects. For instance, it is important to implement efficient methods as well as to know in advance if they will produce reliable outputs. An key concept is then that of *convergence*, which roughly measures if (and in what measure) increase in computational effort yields increase in accuracy.

These two practices—"translating into mathematics" (mathematical modelling) and "feeding equations into the computer" (numerical methods)—fall under the larger umbrella of *applied mathematics*. In this thesis, we make contributions to the field of applied mathematics with two main projects. In the first, we develop new mathematical models of slow sand filters for drinking water treatment. In the second, we apply a method to deal with interface problems between domains with non-matching discretizations, that is, domains for which their computational geometries are not properly aligned.

In the first project, we developed a unified framework for a one-dimensional model of slow sand filters along with a corresponding numerical method. The results agree with the existing literature, indicating that the unified framework manages to generalize existing models. A two-dimensional model of a filter subregion is also studied with positive results.

In the second project, we successfully applied the so-called *Transfer Path Method* for remote coupling of misaligned computational geometries with gaps. Optimal convergence was shown at the theoretical level for a fluid-fluid and a fluid-sand problem under certain assumptions on the gaps, and numerical results validate these findings. Additionally, numerical experiments indicate optimal convergence for a fluid-structure problem.

# Populärvetenskaplig sammanfattning på svenska

För att konceptualisera och beskriva verkliga processer inom naturvetenskap och teknik, använder vi *modeller*, vilka är representanter för processerna. Modellerna används för att kommunicera och bedriva forskning. Exempel är rekonstruktioner i mindre skala, som *modell*tåg, eller större skala, som molekylmodeller i kemi. Genom att utveckla en *matematisk modell* av en process, ”översätta den till matematik”, kan vi i ett kompakt format beskriva hur processen beter sig även där det i verkligheten är svårt eller omöjligt att göra mätningar.

En matematisk modell består av en lista med förenklande antaganden tillsammans med en uppsättning matematiska objekt som beskriver de viktigaste egenskaperna hos processen. I vårt sammanhang motsvarar detta att välja en, två eller tre rumsdimensioner tillsammans med en uppsättning ekvationer. Lösningar till ekvationerna kan ge både kvalitativa och kvantitativa förutsägelser av processens beteende.

Oftast kan ekvationerna i en modell inte lösas med papper och penna, utan kräver beräkningsapproximationer, som fås med så kallade *numeriska metoder*. Användningen av numeriska metoder, så att säga att ”mata in ekvationen i datorn”, involverar både beräkningsmässiga och teoretiska verktyg. Det är till exempel viktigt att både implementera effektiva metoder och att i förväg veta om de kommer att producera tillförlitliga resultat. En särskild egenskap av intresse är *konvergens*, som ungefärligt anger om (och på vilket sätt) mer resurskrävande beräkningar leder till en ökad noggrannhet av resultaten.

Dessa två metoder — att ”översätta till matematik” (matematisk modellering) och att ”mata in ekvationer i datorn” (numeriska metoder) — faller under det större paraplyet *tillämpad matematik*. I denna avhandling bidrar vi till området tillämpad matematik med två huvudprojekt. I det första utvecklar vi nya matematiska modeller av långsamfilter för dricksvattenrening. I det andra tillämpar vi en metod för att hantera gränssnittsproblem mellan olika domäner med icke-matchande diskretiseringar, det vill säga beräkningsgeometrier för närliggande domäner som inte passar ihop.

I det första projektet utvecklade vi ett enhetligt ramverk för en endimensionell modell av långsamfilter tillsammans med en motsvarande numerisk metod. Resultaten överensstämmer med den befintliga litteraturen, vilket indikerar att det enhetliga ramverket lyckas generalisera befintliga modeller. En tvådimensionell modell av ett specifikt område i filtret studeras också med positiva resultat.

I det andra projektet tillämpade vi framgångsrikt den så kallade *Transfer Path-metoden* för fjärrkoppling mellan två olika beräkningsgeometrier som inte passar ihop. Optimal konvergens visades på teoretisk nivå för ett vätske-vätske- och ett vätske-sandproblem under vissa antaganden, och numeriska resultat validerar dessa fynd. Dessutom indikerar numeriska experiment optimal konvergens för ett vätske-strukturproblem.

## Resumen de divulgación científica en español

Para conceptualizar y describir procesos relevantes para las ciencias naturales y la ingeniería, utilizamos *modelos* como representaciones sustitutas, facilitando a su vez la comunicación y la investigación. Ejemplos de modelos incluyen maquetas a pequeña escala, como un tren modelo, o a mayor escala, como un modelo molecular. Al diseñar un modelo matemático de un proceso, al "traducirlo a las matemáticas", podemos comunicar de forma concisa cómo se comporta el proceso incluso donde es difícil o incluso imposible tomar mediciones.

Un modelo matemático consta de una lista de supuestos y objetos matemáticos que describen las leyes de la física que gobernan el proceso. En nuestro contexto, esto implica escoger un espacio en una, dos o tres dimensionas, además de un conjunto de ecuaciones apropiadas. Resolver estas ecuaciones puede entonces entregar predicciones tanto cualitativas como cuantitativas del proceso de interés.

Por lo general, las ecuaciones de un modelo no pueden resolverse a lápiz y papel, requiriendo el uso de aproximaciones computacionales, obtenidas mediante *métodos numéricos*. El uso de métodos numéricos, el "ingresar una ecuación a la computadora", involucra aspectos computacionales y teóricos. Por ejemplo, es importante implementar métodos eficientes desde un punto de vista computacional, así como también determinar de antemano si estos producirán resultados fiables, lo cual requiere el uso de herramientas teóricas. Una concepto clave entonces es la *convergencia*, la cual indica, grosso modo, si un aumento en recursos computacionales resultará efectivamente en un aumento de la precisión y en qué medida.

Estas dos prácticas—la de "traducir a las matemáticas" (modelamiento matemático) y la de "introducir ecuaciones en la computadora" (métodos numéricos)—caen dentro del campo de las matemáticas aplicadas. En esta tesis, contribuimos a las matemáticas aplicadas con dos proyectos. En el primero, desarrollamos nuevos modelos matemáticos de filtros de arena lentos para el tratamiento de agua potable. En el segundo, aplicamos un método para abordar problemas de interfaz entre dominios con discretizaciones no coincidentes, es decir, dominios cuyas geometrías computacionales no están correctamente alineadas.

En el primer proyecto, desarrollamos un marco unificado para un modelo unidimensional de filtros de arena lentos junto con un método numérico. Los resultados concuerdan con la literatura existente, indicando que el marco unificado generaliza modelos existentes. También se estudió un modelo parcial en dos dimensiones, obteniendo resultados positivos.

En el segundo proyecto, aplicamos con éxito el *método de los caminos de transferencia* para el acoplamiento remoto de geometrías desalineadas. Se demostró convergencia óptima a nivel teórico para un problema fluido-fluido y uno fluido-arena bajo suposiciones de la geometría, con resultados numéricos validando estos hallazgos. Además, experimentos numéricos indican convergencia óptima para un problema de interacción fluido-estructura.