

# Přesná řešení dvoufázového proudění v porézním prostředí v obecné prostorové dimenzi

---

Radek Fučík

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská  
České vysoké učení technické v Praze

---

Habilitační přednáška  
13. ledna 2022

## Hlavní témata habilitační práce:

- 1 Přesná řešení úlohy dvoufázového proudění s kapilaritou v obecné dimenzi  
( → náplň habilitační přednášky)
- 2 Numerické řešení metodou smíšených hybridních konečných prvků
- 3 Integrální řešení elektrochemických interakcí v Li-Ion článku

## Obsah habilitační přednášky:

- 1 Proč potřebujeme přesná řešení dvoufázového proudění v porézním prostředí
- 2 Přesné řešení dvoufázového proudění v obecné prostorové dimenzi
- 3 Shrnutí a závěr

# Procesy proudění a transportu v porézním prostředí

## Ekologické aplikace:

- ochrana podzemní vody
- ukládání CO<sub>2</sub>
- šíření škodlivin v podzemí

## Průmyslové aplikace:

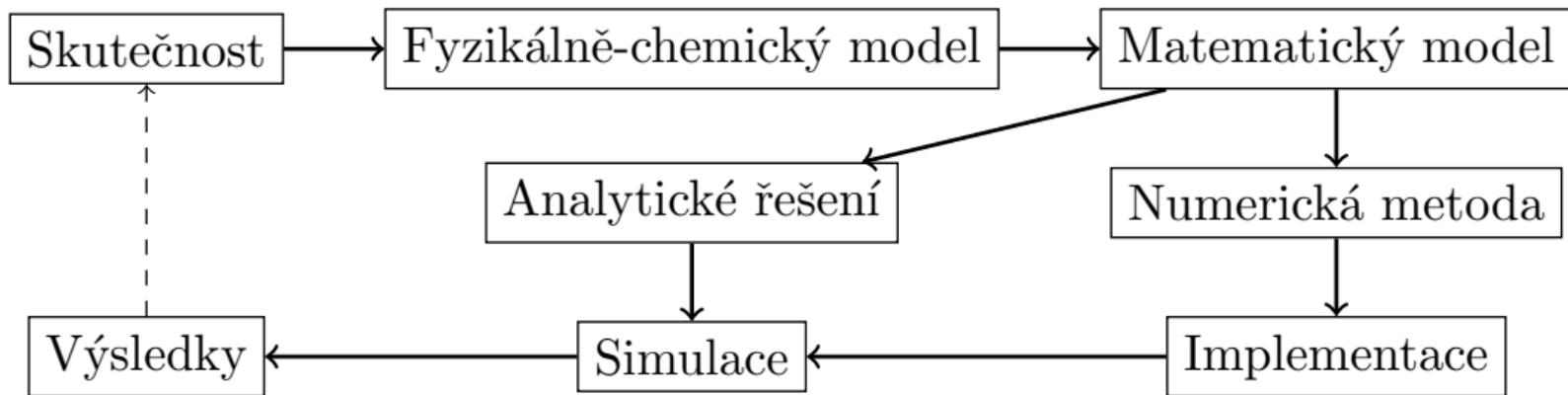
- těžba ropy a plynu
- akumulátory

## Medicínské aplikace:

- perfuze myokardu

Ilustrace procesů v porézním prostředí

## Význam matematického modelování



### Matematické modelování přírodního nebo průmyslového jevu:

- sestavení matematického modelu
- návrh (numerických) metod k jeho řešení
- ověření **věrohodnosti** modelu
- použití modelu k pochopení a predikci jednotlivých procesů

## Dvoufázového proudění v porézním prostředí

### Součásti modelu:

- vzájemně nemísivé fáze:
  - voda
  - olej, ropa, plyn, ...
- kapilarita
- gravitace
- heterogenní prostředí



Snímek experimentu dvoufázového proudění v heterogenním porézním prostředí

## Dvoufázového proudění v porézním prostředí

### Součásti modelu:

- vzájemně nemísivé fáze:
  - voda
  - olej, ropa, plyn, ...
- kapilarita
- gravitace
- heterogenní prostředí

### Veličiny:

- $\phi$  ... porozita
- $\rho$  ... hustota tekutiny (fáze)
- $S$  ... saturace fáze
- $\vec{v}$  ... makroskopická rychlost
- $F$  ... zdrojový člen
- $p$  ... tlak fáze
- $p_c$  ... kapilární tlak
- $K$  ... propustnost prostředí

### Řídící rovnice v $\mathbb{R}^d$ :

- Rovnice kontinuity

$$\frac{\partial(\phi\rho_w S_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_w \vec{v}_w) = F_w$$

$$\frac{\partial(\phi\rho_n S_n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_n \vec{v}_n) = F_n$$

### Konstitutivní vztahy a vazby:

- Darcyho zákon:

$$\vec{v}_w = -\lambda_w \mathbf{K}(\nabla p_w - \rho_w \vec{g})$$

$$\vec{v}_n = -\lambda_n \mathbf{K}(\nabla p_n - \rho_n \vec{g})$$

- Kapilární tlak

$$p_c = p_n - p_w = p_c(S_w)$$

- Balance saturace

$$S_w + S_n = 1$$

## Ukázka porovnání simulace s experimentem

Čas  $t=10$  min



Snímek experimentu dvoufázového proudění v heterogenním porézním prostředí.

[zdroj: CESEP, Colorado School of Mines]



Výsledek numerické simulace (smíšená-hybridní metoda konečných prvků).

[zdroj: RF]

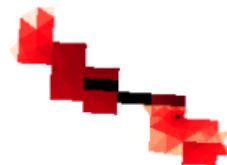
## Ukázka porovnání simulace s experimentem

Čas  $t = 20$  min



Snímek experimentu dvoufázového proudění v heterogenním porézním prostředí.

[zdroj: CESEP, Colorado School of Mines]



Výsledek numerické simulace (smíšená-hybridní metoda konečných prvků).

[zdroj: RF]

## Ukázka porovnání simulace s experimentem

Čas  $t=40$  min



Snímek experimentu dvoufázového proudění v heterogenním porézním prostředí.

[zdroj: CESEP, Colorado School of Mines]



Výsledek numerické simulace (smíšená-hybridní metoda konečných prvků).

[zdroj: RF]

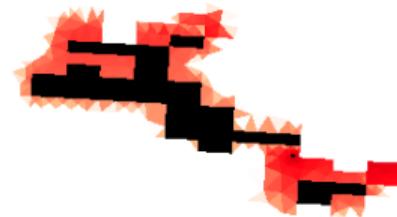
## Ukázka porovnání simulace s experimentem

Čas  $t=1$  h



Snímek experimentu dvoufázového proudění v heterogenním porézním prostředí.

[zdroj: CESEP, Colorado School of Mines]

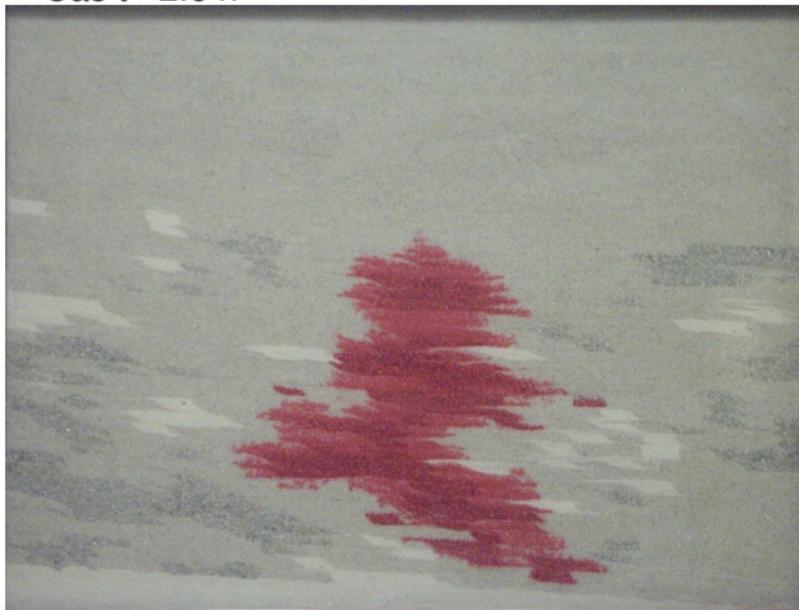


Výsledek numerické simulace (smíšená-hybridní metoda konečných prvků).

[zdroj: RF]

## Ukázka porovnání simulace s experimentem

Čas  $t = 2.6$  h



Snímek experimentu dvoufázového proudění v heterogenním porézním prostředí.

[zdroj: CESEP, Colorado School of Mines]



Výsledek numerické simulace (smíšená-hybridní metoda konečných prvků).

[zdroj: RF]

## Ukázka porovnání simulace s experimentem

Čas  $t = 4.6$  h



Snímek experimentu dvoufázového proudění v heterogenním porézním prostředí.

[zdroj: CESEP, Colorado School of Mines]



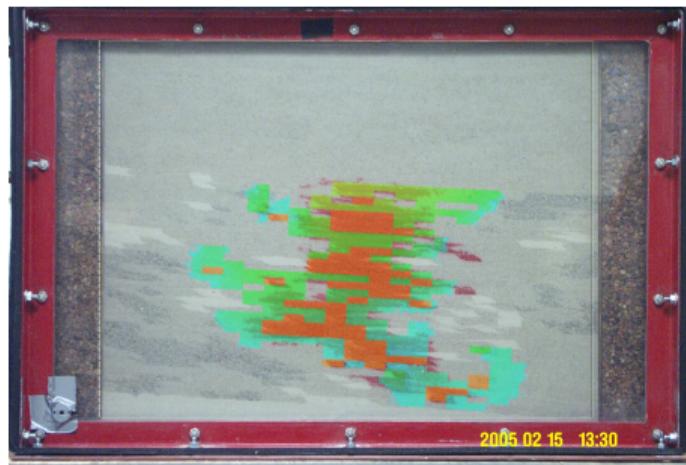
Výsledek numerické simulace (smíšená-hybridní metoda konečných prvků).

[zdroj: RF]

## Zkoumání věrohodnosti numerického řešení

### Srovnání s experimentem – **validate**:

- nepřesnosti nebo nízké rozlišení experimentálního měření
- pouze přibližné srovnání
- obtížnost a vysoká cena provedení experimentu



### Srovnání s přesným (analytickým) řešením – **verifikace**:

- umožňuje změřit chybu numerického řešení
- slouží k analýze přesnosti a konvergence numerické metody
- omezení formulace testovací úlohy

## Formulace úlohy v $\mathbb{R}^d$

Rovnice dvoufázového nestlačitelného proudění v  $\mathbb{R}^d$ :

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot (f(S_w)\vec{u} - D(S_w)\nabla S_w) = 0$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0$$

**Předpoklady a definice:**

• bez gravitace:  $\vec{g} = \vec{0}$

• izotropie prostředí:  $\mathbf{K} = K\mathbf{I}$

• totální rychlost:  $\vec{u} = \vec{v}_w + \vec{v}_n$

• frakční toková funkce:  $f = \frac{\lambda_w}{\lambda_w + \lambda_n}$

• kapilární difuze:  $D = -\frac{K\lambda_w\lambda_n}{\lambda_w + \lambda_n} \frac{dp_c}{dS_w}$

• okrajové podmínky (v radiálním směru):

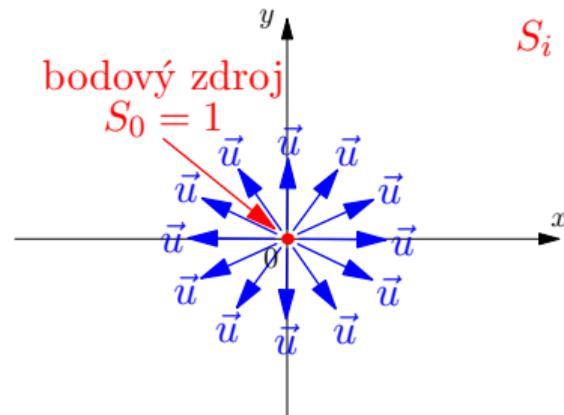
$$S_w(t, 0) = 1, \quad S_w(t, +\infty) = S_i$$

• počáteční podmínka:

$$S_w(0, r) = S_i$$

• předpoklad symetrie dle počátku  $\vec{0}$ :

$$S_w = S_w(t, r), \quad \vec{u} = \vec{u}(t, r)$$



## Sférická transformace rovnic v $\mathbb{R}^d$ :

Rovnice pro  $S_w = S_w(t, r)$ :

$$\gamma_d r^{d-1} \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + (1 - f(S_i)) Q_0 \frac{\partial F}{\partial r} = 0$$

- funkce  $F = F(t, r)$ :

$$F := \frac{Q_w - f(S_i)}{1 - f(S_i)} = F_w - \frac{\gamma_d r^{d-1}}{(1 - f(S_i)) Q_0} D \frac{\partial S_w}{\partial r}$$

- funkce  $Q_w = Q_w(t, r)$ :

$$Q_w := \gamma_d r^{d-1} v_w = f Q_0 - \gamma_d r^{d-1} D \frac{\partial S_w}{\partial r}$$

- funkce  $F_w = F_w(S_w) \dots$  normalizovaná funkce  $f$ :

$$F_w(S_w) := \frac{f(S_w) - f(S_i)}{1 - f(S_i)}$$

Rovnice pro  $\vec{u} = \vec{u}(t, \vec{x})$ :

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0$$

- po sférické transformaci je řešení ve tvaru

$$\vec{u}(t, r) = \frac{Q_0(t)}{\gamma_d r^{d-1}} \vec{t}$$

- $Q_0 \dots$  koeficient rychlosti vtoku
- $\gamma_d \dots$  povrch jednotkové koule v  $\mathbb{R}^d$ :

$$\gamma_d = \frac{d\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)}$$

- $\vec{t} \dots$  jednotkový vektor v kladném radiálním směru

## Transformace na obyčejnou diferenciální rovnici (ODR)

Rovnice pro  $S_w = S_w(t, r)$ :

$$\gamma_d r^{d-1} \phi \frac{\partial S_w(t, r)}{\partial t} + (1 - f(S_i)) Q_0(t) \frac{\partial F(t, r)}{\partial r} = 0 \quad (*)$$

Pro

$$Q_0(t) = At^{\frac{d-2}{2}}$$

Ize pomocí záměny proměnných  $\lambda(S_w) = rt^{-\frac{1}{2}}$  převést (\*) na ODR pro  $F = F(S_w)$  na  $(S_i, S_0)$ :

$$F'' (F')^{\frac{2}{d}-2} = -A^{-\frac{2}{d}} \frac{C_d D}{F - F_w}$$

s okrajovými podmínkami

$$F(S_i) = 0$$

$$F(S_0) = 1$$

- $C_d = d \left( \frac{\gamma_d}{1-f(S_i)} \right)^{\frac{2}{d}} \left( \frac{\phi}{2} \right)^{\frac{2}{d}-1} \dots$  konstanta

## Integrační řešení ODR

$$F'' (F')^{\frac{2}{d}-2} = -A^{-\frac{2}{d}} \frac{C_d D}{F - F_w}$$

- pro  $d = 1$  a  $d = 2$ : McWhorter a Sunada (1990), Fučík et al. (2007)
- pro  $d \geq 3$ : Fučík, Illangasekare a Beneš (2016):

$$F(S_w) = \int_{S_i}^{S_w} \left[ (F'(S_i^+))^{\frac{2-d}{d}} + \frac{d-2}{d} C_d A^{-\frac{2}{d}} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right]^{\frac{d}{2-d}} d\beta$$

s vazbou pro neznámou hodnotu  $F'(S_i^+)$ :

$$1 = \int_{S_i}^{S_0} \left[ (F'(S_i^+))^{\frac{2-d}{d}} + \frac{d-2}{d} C_d A^{-\frac{2}{d}} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right]^{\frac{d}{2-d}} d\beta$$

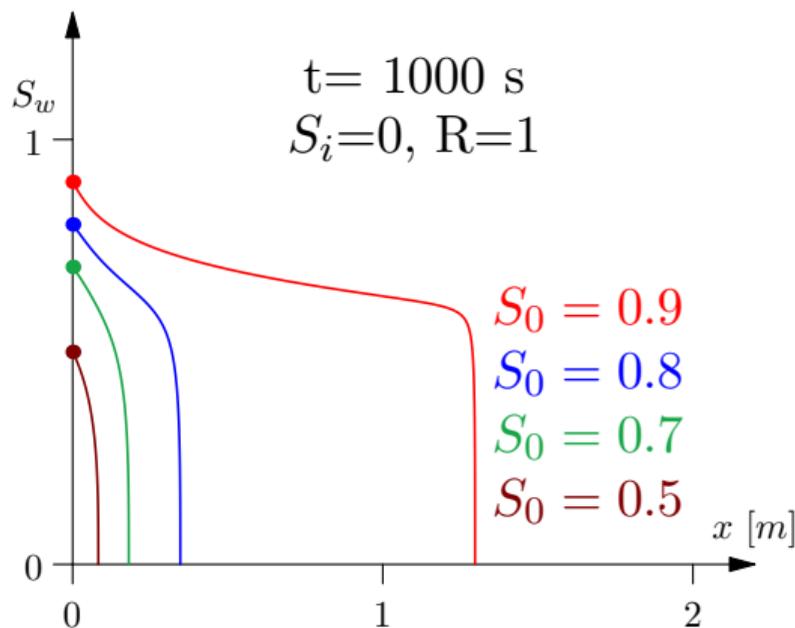
- online implementace řešení pro  $d = 1$ ,  $d = 2$ , a  $d \geq 3$ :

<http://mmg.fjfi.cvut.cz/~fucik/exact1d>

<http://mmg.fjfi.cvut.cz/~fucik/exact>

## $d = 1$ : McWhorterovo a Sunadovo řešení v $\mathbb{R}^1$

- $u = RA t^{-\frac{1}{2}}$
- $S_w(t, 0) = S_0$
- $A = A(S_0)$
- $R \in (-\infty, 1]^*$

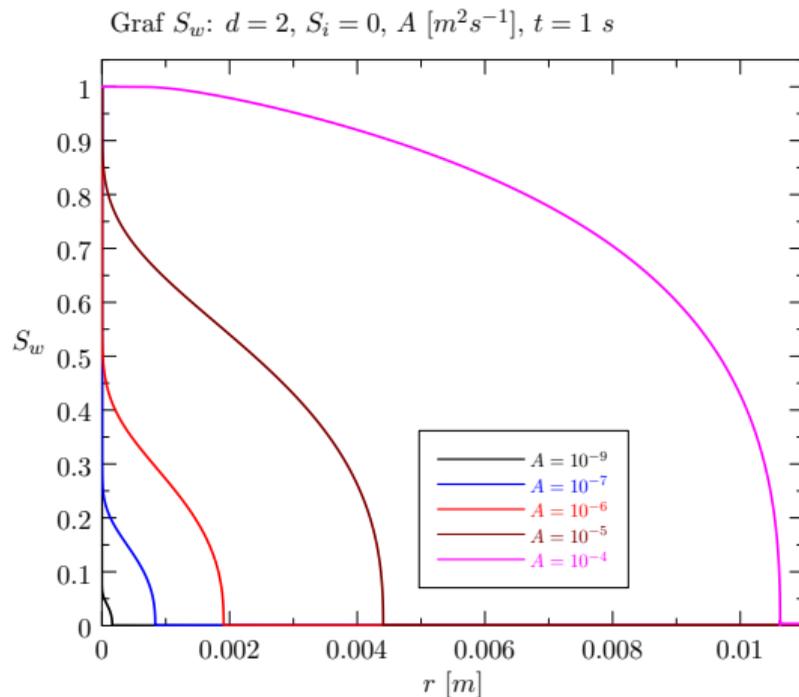


Ukázka řešení pro různé hodnoty  $S_0$ .

\*R. Fučík, J. Mikyška, T. H. Illangasekare, M. Beneš (2007)

$d = 2$ : McWhorterovo a Sunadovo řešení v  $\mathbb{R}^2$ 

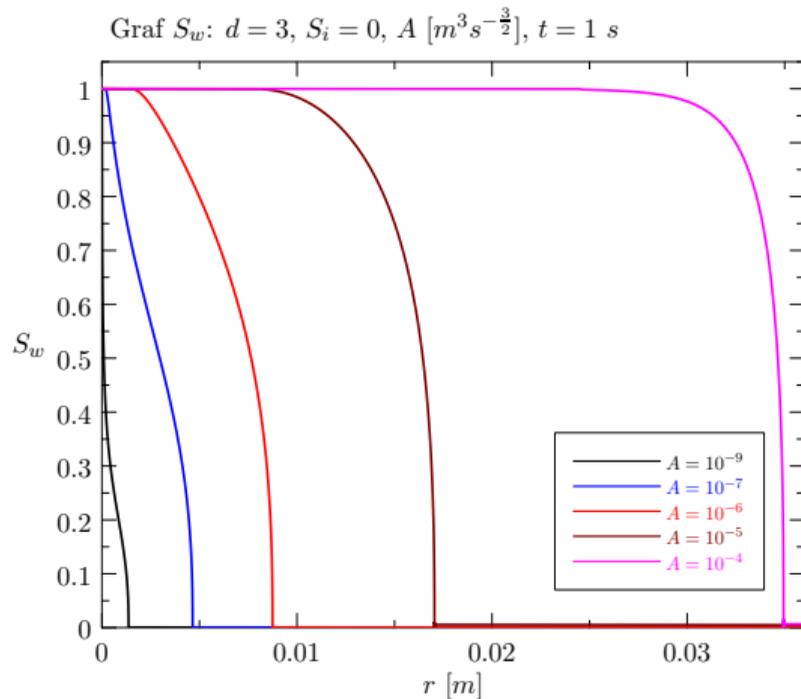
- $\|\vec{u}\| = A$
- $S_w(t, \vec{0}) = 1$



Ukázka řešení pro různé hodnoty  $A$ .

## $d \geq 3$ : Fučík, Illangasekare a Beneš (2016)

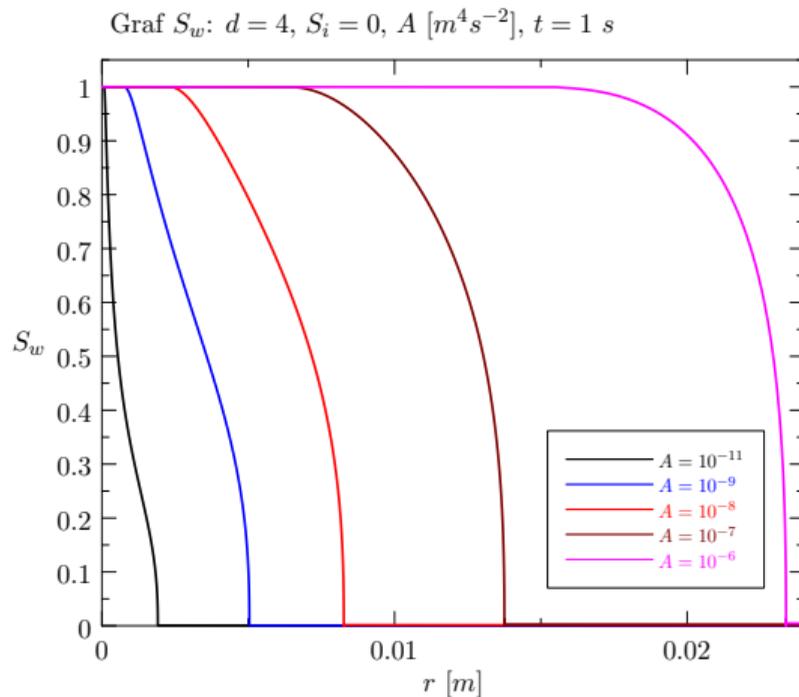
- $\|\vec{u}\| \propto At^{\frac{d-2}{2}}$
- $S_w(t, \vec{0}) = 1$



Ukázka řešení pro  $d = 3$  pro různé hodnoty  $A$ .

## $d \geq 3$ : Fučík, Illangasekare a Beneš (2016)

- $\|\vec{u}\| \propto At^{\frac{d-2}{2}}$
- $S_w(t, \vec{0}) = 1$



Ukázka řešení pro  $d = 4$  pro různé hodnoty  $A$ .

## Shrnutí a závěr 1/5

### Hlavní příspěvky autora v problematice přesných řešení dvoufázového proudění v porézním prostředí:

- Formulace a nalezení přesného řešení  $\mathbb{R}^d$  pro  $d \geq 3$
- Návrh iteračních numerických metod pro řešení integrálních rovnic pro  $d \in \mathbb{N}$
- Odvození přesného řešení pro úlohu s materiálovou nespojitostí
- Implementace iteračních řešičů integrálních rovnic ve formě webových aplikací volně dostupných vědecké komunitě:
  - pro  $d = 1$ :  
<http://mmg.fjfi.cvut.cz/~fucik/mcwhorter>
  - pro  $d \geq 2$ :  
<http://mmg.fjfi.cvut.cz/~fucik/exact>
  - pro jednorozměrnou úlohu v porézním prostředí s materiálovou nespojitostí:  
<http://mmg.fjfi.cvut.cz/~fucik/exacthetero>

## Shrnutí a závěr 2/5

### Hlavní autorovy publikace k problematice přesných řešení:



**R. Fučík, T. H. Illangasekare, and M. Beneš**

Multidimensional self-similar analytical solutions of two-phase flow in porous media  
*Advances in Water Resources* (2016), 51–56, IF 4.51.



**M. Beneš, R. Fučík, J. Mikyška, and T. H. Illangasekare**

Analytical and Numerical Solution for One-Dimensional Two-Phase Flow in Homogeneous Porous Medium  
*Journal of Porous Media* (2009), vol. 12, no. 12, pages 1139-1152, IF 1.752



**R. Fučík, J. Mikyška, M. Beneš, and T. H. Illangasekare**

Semianalytical Solution for Two-Phase Flow in Porous Media with a Discontinuity  
*Vadose Zone Journal* (2008), 1001–1007, IF 3.289.



**R. Fučík, J. Mikyška, M. Beneš, and T. H. Illangasekare**

An Improved Semi-Analytical Solution for Verification of Numerical Models of Two-Phase Flow in Porous Media  
*Vadose Zone Journal* (2007), 93–104, IF 3.289.

## Shrnutí a závěr 3/5

### Další příspěvky autora v souvisejících oblastech:

- Integrovaná řešení elektrochemických interakcí v Li-Ion článku



**M. Beneš, R. Fučík, V. Havlena, V. Klement, M. Kolář, O. Polívka, J. Solovský, and P. Strachota**

An Efficient and Robust Numerical Solution of the Full-Order Multiscale Model of Lithium-Ion Battery

*Mathematical Problems in Engineering* (2018), Article ID 3530975, IF 1.305

- Použití přesných řešení k verifikaci numerických řešičů



**R. Fučík, J. Klinkovský, J. Solovský, T. Oberhuber and J. Mikyška**

Multidimensional mixed-hybrid finite element method for compositional two-phase flow in heterogeneous porous media and its parallel implementation on GPU

*Computer Physics Communications* (2019), 165-180, IF 4.390



**A. H. Askar, T. H. Illangasekare, A. Trautz, J. Solovský, Y. Zhang, and R. Fučík**

Exploring the Impacts of Source Condition Uncertainties on Far-Field Brine Leakage Plume Predictions in Geologic Storage of CO<sub>2</sub>: Integrating Intermediate-Scale Laboratory Testing with Numerical Modeling

*Water Resources Research* (2021), e2021WR029679, IF 5.240



**J. Solovský, R. Fučík, and J. Šístek**

BDDC for MHFEM discretization of unsteady two-phase flow in porous media

*Computer Physics Communications* (2022), 108199, IF 4.390

## Shrnutí a závěr 4/5

### Pedagogická činnost:

- Vedení studentů v dané nebo příbuzné problematice:
  - O. Šembera (BP 2013)
  - O. Pelech (BP 2014, DP 2017)
  - J. Solovský (BP 2014, DP 2016, nyní PGS)
  - J. Klínek (BP 2015, DP 2017, nyní PGS)
  - P. Eichler (BP 2016, DP 2018, nyní PGS)
  - V. Straka (BP 2016, DP 2019)
  - A. Čala (BP 2018)
  - J. Kovář (BP 2020, letos DP)
  - J. Bureš (letos BP)
  - L. Horvátová (letos BP)
  - D. Horák (letos BP)
- Zavedení nových předmětů na FJFI ČVUT v Praze:
  - 01DYKO **Dynamika kontinua** (společně s P. Strachotou) v BS přednášky od roku 2013
  - 01NELO **Nelineární optimalizace** v NMS přednášky od roku 2019, **garant předmětu**
  - 01LBM **Mřížková Boltzmannova metoda** (společně s P. Eichlerem) v BS přednášky a cvičení od roku 2020, **garant předmětu**
- Výuka dalších předmětů na FJFI ČVUT v Praze:
  - 01MAT12 **Matematika 1, 2** v BS přednášky a cvičení od roku 2006, **garant předmětu**
  - 01MAA34 / 01ANA3 **Matematická analýza 3, 4** v BS cvičení od roku 2005

## Shrnutí a závěr 5/5

### Hlavní oblasti současné výzkumné činnosti a výhled do budoucna:

#### Proudění a transport v porézním prostředí

- přesná (analytická) řešení
- medicínské aplikace (perfuze myokardu)
- problematika hlubinného ukládání CO<sub>2</sub>
- puklinové proudění
- interakce mezi porézním a volným prostředím

#### Mřížková Boltzmannova metoda (Lattice Boltzmann method, LBM)

- odvození a studium ekvivalentních parciálních diferenciálních rovnic (analýza)
- medicínské, průmyslové a environmentální aplikace
- studium použitelnosti k modelování proudění v mezní vrstvě atmosféry
- popularizace metody a její výuka na FJFI ČVUT v Praze - předmět **01LBM**

#### Orientace na volnou dostupnost výsledků vědecké komunitě

- přesná řešení úlohy dvoufázového proudění v porézním prostředí jako webová aplikace
- programy s otevřeným kódem: <https://mmg-gitlab.fjfi.cvut.cz>

Děkuji Vám za pozornost.

## Web of Science (6. ledna 2022):

<b>Publications</b> <b>28</b> Total From 2006 to 2022	<b>Citing Articles</b> <b>140</b> Analyze Total <b>124</b> Analyze Without self-citations	<b>Times Cited</b> <b>165</b> Total <b>137</b> Without self-citations	<b>5.89</b> Average per item	<b>7</b> H-Index
--	---	---	---------------------------------	---------------------

## Významné publikace od roku 2020:

- [10.1016/j.cpc.2021.108199](#), Computer Physics Communications, 2022, IF 4.390
- [10.1029/2021WR029679](#), Water Resources Research, 2021, IF 5.240
- [10.1016/j.camwa.2021.03.016](#), Computer & Mathematics with Applications, 2021, IF 3.476
- [10.1016/j.camwa.2021.03.014](#), Computer & Mathematics with Applications, 2021, IF 3.476
- [10.3934/dcdss.2020349](#), Discrete & Continuous Dynamical Systems - S, 2021, IF 2.425
- [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.119050](#), International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, IF 5.584
- [10.1007/s10334-020-00837-5](#), Magnetic Resonance Materials in Physics, Biology and Med., 2020, IF 2.310
- [10.1016/j.jcp.2019.109178](#), Journal of Computational Physics, 2020, IF 3.553

Řešitel 1 mezinárodního projektu, spoluřešitel 1 ukončeného projektu GAČR

Počty vedených studentů (2022): 3 BS, 1 NMS, 2 PGS, 1 PGS-specialista

Počty obhájených prací vedených studentů: 8 BP, 5 DP

Celkem vyučovaných předmětů: 5 přednášek, 1 cvičení

Zavedení nových předmětů: 3

následují odpovědi na dotazy oponentů →