

Metoda konačnih volumena za dvofazni tok kroz poroznu sredinu

Borić, Donata

Master's thesis / Diplomski rad

2022

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:222170>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-11-25**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Donata Borić

**METODA KONAČNIH VOLUMENA ZA
DVOFAZNI TOK KROZ POROZNU
SREDINU**

Diplomski rad

Voditelj rada:
prof. dr. sc. Mladen Jurak

Zagreb, Srpanj, 2022

Ovaj diplomski rad obranjen je dana _____ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. _____, predsjednik
2. _____, član
3. _____, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _____.

Potpisi članova povjerenstva:

1. _____
2. _____
3. _____

*Mami, tati, sestrama, babama i didama
za svu ljubav i podršku
Prijateljima jer mi uljepšavaju
svakodnevicu
Mentoru zbog svog strpljenja
i pomoći
Žapcu.. di sam odškolovala svoje
studentske dane*



Sadržaj

| | |
|---|-----------|
| Sadržaj | iv |
| Uvod | 1 |
| 1 Fluid u poroznoj sredini, osnovna svojstva | 2 |
| 1.1 Opis sustava | 2 |
| 1.2 Koncept zasićenja | 3 |
| 1.3 Koncept tlaka i površinske napetosti | 3 |
| 2 Jednadžba sačuvanja mase | 7 |
| 2.1 Uvod | 7 |
| 2.2 Perspektiva na makroskali | 8 |
| 3 Darcyjev zakon | 10 |
| 4 Dvofazni tok nemješivog fluida | 12 |
| 4.1 Reformulacija modela | 14 |
| 4.2 Izvod Buckley-Leverettove jednadžbe | 15 |
| 4.3 Rubni uvjeti | 17 |
| 5 Numerički postupak rješavanja modela | 19 |
| 5.1 Metoda konačnih volumena | 19 |
| 5.2 IMPES algoritam | 25 |
| 6 Numeričke simulacije | 26 |
| 6.1 Primjer 1 | 26 |
| 6.2 Primjer 2 | 31 |
| 6.3 Primjer 3 | 33 |
| Bibliografija | 35 |

Uvod

Tok fluida u prirodi uvijek prati najefikasniji mogući put, a samo gibanje se može opisati matematičkim modelima. Proučavanje gibanja fluida kroz šupljine u zemlji, ili na samoj površini ima veliku važnost u tehničkim disciplinama kao što su naftno inženjerstvo, hidrologija, agronomija,.. Tok koji se proučava može sadržavati različite kemijske komponente, ili pak biti sastavljen od različitih fluida, koji se međusobno mogu i ne moraju miješati.

U ovome radu je uveden model dvofaznog toka kroz poroznu sredinu te je opisana metoda konačnih volumena za njegovo numeričko rješavanje. Pritom je rad organiziran na sljedeći način. U prvom poglavlju je definirana porozna sredina te je dan njen opis, kao i jedno karakteristično svojstvo. Zatim je uveden tok fluida u poroznoj sredini sa svojim karakterističnim svojstvima.

U drugom poglavlju je uvedena jednadžba sačuvanja mase na mikroskali. Jer je u proučavanju porozne sredine zastupljena makroskala, dan je i oblik jednadžbe na makroskali. Pomoću nje možemo predvidjeti transport mase unutar sustava.

U trećem poglavlju je opisan Darcyjev zakon koji povezuje gradijent tlaka sa prividnom makroskopskom brzinom. On predstavlja konstitutivni zakon na makroskali te su stoga u ovome poglavlju opisana makroskopska svojstva fluida i porozne sredine koju promatramo.

Pomoću jednadžbe sačuvanja mase te Darcyjevog zakona, četvrto poglavlje uvodi dvofazni tok nemješivog fluida. Model se sastoji od šest jednadžbi i šest nepoznanica koje se zatim reformuliraju u dvije parcijalne diferencijalne jednadžbe s dvije nepoznanice. Zatim je izvedena Buckley-Leverettova jednadžba koja predstavlja pojednostavljeni tok fluida u jednoj dimenziji (horizontalnoj). Za potpuni opis matematičkog modela potrebno je navesti rubne i početne uvjete te su stoga i oni spomenuti.

Peto poglavlje opisuje numeriku koja se koristi kod rješavanja uvedenog matematičkog modela. Za prostornu diskretizaciju se koristi metoda konačnih volumena, a ovdje su opisane neke od njezinih verzija (TPFA, MPFA te Box metoda). Vremenska diskretizacija podrazumijeva diferenciju unazad. Nakon odabira diskretizacijske tehnike, primjenom IMPES algoritma matematički model se rješava efikasno te zahtjeva manje memorije računala od drugih metoda.

U šestom poglavlju su opisane tri numeričke simulacije od različitih dvofaznih nemješivih modela. Simulacije su napravljene u programskoj biblioteci DuMu^x.

Poglavlje 1

Fluid u poroznoj sredini, osnovna svojstva

1.1 Opis sustava

Definicija. *Faza* je tekućina, kruta tvar ili plin koja je od druge krutine, tekućine ili plina odvojena prepoznatljivom granicom.

Definicija. *Poroznost* je prisutnost šupljina ili pukotina unutar materijala. *Porozna sredina* je svaki materijal koji odlikuje poroznost. Domena sastavljena od šupljina koje su fluidu na raspolaganju za gibanje se zove *porni prostor*.

Zbog velike razlike u karakterističnim dimenzijama pornog prostora i domene u kojoj promatramo gibanje fluida, postoje dvije različite prostorne skale: mikroskopska i makroskopska. U makroskopskom modelu svaka točka predstavlja volumen koji je dovoljno velik da sadrži čvrstu fazu te fluid u pornom prostoru. Taj se volumen zove *reprezentativni elementarni volumen, REV*. Veličina REV-a se odabire tako da su prosječne vrijednosti neosjetljive na male promjene u veličini REV-a, a variraju u vremenu i prostoru.

S obzirom na to da poroznost varira s položajem, ako skup $\Omega(\mathbf{x})$ predstavlja REV u točki \mathbf{x} , poroznost je izražena kao:

$$\varepsilon = 1 - \frac{1}{|\Omega(\mathbf{x})|} \int_{\Omega(\mathbf{x})} d\mathbf{x}, \quad (1.1)$$

gdje je $|\Omega(\mathbf{x})|$ volumen od $\Omega(\mathbf{x})$.

Vidimo da je poroznost karakteristična za cijeli uzorak, ali ne pruža informaciju kako je porni volumen distribuiran u uzorku.

Porozna sredina predstavlja specifičan skup fizičkih svojstava što je razlikuje od općih višefaznih sustava. Najznačajniji od ovih su zahtjevi da postoji više od jedne faze unutar određenog kontrolnog volumena, da jedna od njih bude relativno nepomična kruta tvar te da je barem jedna od ovih faza fluid. Nadalje, porozna sredina zahtjeva da čvrsta faza bude povezana te da sadrži višestruko povezani prostor dostupan fluidu, tj. da je porni prostor kontinuiran. Struktura pornog prostora unutar krute tvari treba biti takva da postoje putevi koji povezuju sve regije sustava. Za fluid to predstavlja mogućnost prolaska od jedne lokacije do druge unutar porozne sredine.

Napomena. Za poroznu sredinu, brzina čvrste faze, \mathbf{v}^s , u odnosu na granicu sustava mora biti značajnije manja od brzine fluida koji protječe kroz taj porozni sustav. Dalje će se podrazumijevati da je čvrsta faza potpuno nepomična, tj. $\mathbf{v}^s = 0$. Također, precizna definicija "povezanosti" krute faze nije moguća.

U ovome radu promatramo poroznu sredinu u kojoj dva različita fluida ispunjavaju čitav porni prostor te se takav tok zove *dvofazni tok*. Općenito se faza obilježava oznakom: α . Također, unutar svake pore postoji dobro definirana granica koja separira fluide pa je tok fluida *nemješiv*. Standardni primjeri nemješivih sustava su sustavi nafta-voda te voda-zrak.

1.2 Koncept zasićenja

Definicija. *Zasićenje* fluida α -faze u uzorku volumena porozne sredine Ω , u oznaci s^α , je dano izrazom:

$$s^\alpha = \frac{1}{\Omega^v} \int_{\Omega^\alpha} d\mathbf{x} = \frac{\Omega^\alpha}{\Omega^v}, \quad (1.2)$$

gdje je Ω^v volumen pora u uzorku, a Ω^α volumen fluida α -faze u uzorku. Za volumen pora vrijedi $\Omega^v = \Omega \setminus \Omega^s$.

Ako za uzorak uzmemo cijelu poroznu sredinu, dobit ćemo prosječnu vrijednost zasićenja sredine u bilo kojem vremenskom trenutku. Zasićenje uzima vrijednosti iz intervala $[0,1]$; gdje 0 predstavlja da nema fluida u uzorku, a 1 da je sve ispunjeno s fluidom. Nadalje, poroznost područja kroz koje prolazi fluid α -faze je dana sa:

$$\varepsilon^\alpha = s^\alpha \varepsilon. \quad (1.3)$$

1.3 Koncept tlaka i površinske napetosti

U dvofaznom nemješivom toku na granici između dva fluida djeluje sila koja ne dozvoljava njihovo međusobno miješanje, a ovdje će se opisati na primjeru sustava voda-zrak. Stoga su

na makroskali u svakoj točki prostora prisutne vodena i plinovita faza fluida te se promatra interakcija između njih.

Objašnjenje interakcija između fluida i krutine leži u molekularnoj strukturi fluida te načinu na koji se ta struktura odnosi na molekule koje su na površini krutine. Ploha koja odvaja fluid α -faze od krutine se označava sa: αs . Kada bi za primjer uzeli vodu, njene molekule se međusobno privlače. Ali, na granici kapljice unutrašnje sile nisu u ravnoteži s vanjskim privlačnim silama te je rezultat toga modifikacija strukturnog rasporeda molekula na površini kapi. Povećanje površine zahtjeva da privlačne sile molekula budu savladane. Promjena u energiji ima vrijednost γdA , gdje je A površina. Za plohu između 2 različita fluida γ označava *međufaznu napetost*, a u slučaju plohe između fluida i njegove pare γ označava *površinsku napetost* te ima jedinicu sile po jediničnoj duljini, ili energije po jediničnoj površini.

Kada se voda u cijevčici nalazi u ravnoteži, tada mora postojati ravnoteža među silama koje djeluju na plohi između vodene i plinovite faze. Prisutne sile su tlak zraka, koji djeluje na konkavnoj strani plohe, vodeni tlak, koji djeluje na konveksnoj strani plohe te međufazna napetost, koja djeluje kao tangenta na površinu. Fluid na konkavnoj strani, u ovome slučaju zrak, se zove *nevlažeći fluid* jer je manje privlačan krutini od drugog fluida. Svojstva nevlažećeg fluida će imati indeks n pa se tako njegov tlak označava sa p_n . Fluid sa konveksne strane plohe, u ovome slučaju voda, se naziva *vlažeći fluid* jer više vlaži krutinu. Slično, svojstva vlažećeg fluida sadržavaju indeks w , stoga se njegov tlak označava sa p_w .

Sile koje djeluju na plohi separacije između vlažeće i nevlažeće faze, w_n , uključuju tlakove fluida te površinsku napetost. Prilikom prolaska kroz plohu w_n , tlak trpi skok koji je određen *Young-Laplaceovim zakonom*. Taj zakon je izražen sljedećim jednadžbama:

$$p_n - p_w = \frac{2\gamma}{r^*}, \quad \frac{2}{r^*} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}, \quad (1.4)$$

gdje je r^* srednji radijus zakrivljenosti plohe w_n , a R_1 i R_2 glavni radijusi zakrivljenosti plohe w_n .

Kapilarni tlak, p_c , je definiran kao razlika tlakova u vlažećem i nevlažećem fluidu, tj. $p_c = p_n - p_w$.

Definicija. Za fluid α -faze, $\alpha \in \{w, n\}$, kut između plohe w_n i plohe αs definira se kao *kut vlaženja*, θ . Ako je kut za fluid α -faze manji od 90° , kažemo da je taj fluid *vlažeći*; u suprotnome je *nevlažeći*.

U eksperimentima s uranjanjem kapilarnih cijevčica u vodu, primjećeno je da će se voda povući na veću visinu što je cijevčica uža. To pokazuje da je kapilarni tlak na granici između vode i zraka veći u užim cijevčicama. Stoga, ako u poroznoj sredini inicijalno ispunjenoj vlažećom fazom, krene ulaziti nevlažeća faza, ona će prvo prodrati u pore većeg

dijametra. Ovo se događa jer je u manjim porama kapilarni tlak, koji je potrebno savladati, veći. Na makroskopskoj perspektivi se može zaključiti da će opadanjem zasićenja vlažeće faze, s^w , makroskopski kapilarni tlak, p_c , postajati veći.

Kako na makroskali nema granice između različitih faza, u svakoj točki makroskopskog kontinuuma postoje tlakovi vlažeće i nevlažeće faze. Oni predstavljaju srednje vrijednosti tih tlakova po unaprijed određenom volumenu koji sadrži obje faze. Kapilarni tlak je na makroskali prikazan kao funkcija zasićenja vlažeće faze te vrijedi

$$p_c(s^w) = p_n - p_w. \quad (1.5)$$

Tlak u nevlažećem fluidu je uvijek veći nego u vlažećem pa slijedi da je kapilarni tlak pozitivna monotona padajuća funkcija.

Iz eksperimenta sa uranjanjem cijevčice je također zaključeno da će se voda uvijek popeti na istu razinu neovisno o tome koliko je duboko cijevčica uronjena. Situacija je drugačija ako se dijametar cijevčice mijenja njenom dužinom. Tada visina rasta vode ovisi o tome koliko je duboko uronimo te jeli se u cijevčici odvija proces *ocjeđivanja* (istiskivanja vlažeće faze nevlažećom), ili obrnuti proces *vlaženja*. Ova dva procesa će dati različite krivulje za p_c i s^w , odnosno krivulja kapilarnog tlaka pokazuje *histerezu*. Histereza opisuje različito ponašanje procesa koji ovisi o smjeru u kojem se proces odvija. Razlika se ovdje događa jer manje pore kontroliraju ocjeđivanje, dok veće kontroliraju vlaženje. Tako za istu vrijednost s^w , kapilarni tlak je veći u slučaju ocjeđivanja.

Potpuno istiskivanje jedne od dviju faza nije u potpunosti moguće, a to krajnje zasićene faze koja se istiskuje nazivamo *rezidualnim zasićenjem*, s^{wr} i s^{nr} . Na primjer, u procesu ocjeđivanja vlažeća faza neće biti potpuno istisnuta nevlažećom već će jedan dio te faze ostati prisutan u obliku tankog sloja fluida oko zrnaca porozne sredine i slobodnih kapljica. Krivulja kapilarnog tlaka u točki s^{wr} ima vertikalnu asimptotu. Uobičajeno je uvesti *reducirana zasićenja* [3]:

$$\overline{s^w} = \frac{s^w - s^{wr}}{1 - s^{wr} - s^{nr}}, \quad \overline{s^n} = \frac{s^n - s^{nr}}{1 - s^{wr} - s^{nr}}, \quad (1.6)$$

koja se uvijek nalaze između 0 i 1 te zadovoljavaju $\overline{s^w} + \overline{s^n} = 1$. Kapilarni tlak se često definira kao funkcija reduciranog zasićenja.

Također, da bi u poroznu sredinu potpuno ispunjenu vlažećom fazom uopće mogla ući nevlažeća faza, potrebno je savladati *ulazni tlak*, $p_n - p_w$, koji može biti strogo pozitivan. Ulazni tlak ovisi o najvećem dijametru pore jer su tu efekti kapilarnog tlaka najmanji. Kod procesa vlaženja, tj kada je $s^w = 0$, ulazni tlak nije potrebno savladati.

Među najpoznatije parametarske modele koji se primjenjuju u sustavima voda-plin ulaze Brooks-Coreyev i van Genuchtenov model kapilarnog tlaka.

Van Genuchtenov model kapilarnog tlaka je dan formulom:

$$p_c(s^w) = \frac{1}{\alpha} (\overline{s^w}^{-1/m} - 1)^{1/n}, \quad (1.7)$$

gdje je $n = 2, \dots, 5$ i $m = 1 - 1/n$. Sljedeći je Brooks-Coreyev model koji je zadan preko ulaznog tlaka, a glasi:

$$p_c(s^w) = p_e (\overline{s^w})^{-1/\lambda}, \quad (1.8)$$

gdje je $\lambda > 0$.

Poglavlje 2

Jednadžba sačuvanja mase

2.1 Uvod

Modeliranje fizičkih pojava najkorisnije je kada se temelji na opisu temeljnih procesa koji proizvode promatrano ponašanje, a ne na korelacijama promatranih podataka. Ako su procesi dobro opisani, može se predvidjeti kako će sustav reagirati kada je podvrgnut drugačijim uvjetima. Jedan od takvih principa je *sačuvanje mase* koji pokazuje da se masa ne stvara i ne uništava. **Zakon sačuvanja mase** govori da je za svaki kontrolni volumen Ω , brzina promjene mase u njemu jednaka brzini ulaska i brzini izlaska mase iz njega. Tako je model dvofaznog nemješivog toka zasnovan na jednadžbama sačuvanja mase, Darcyjevoj jednadžbi te dodatnim relacijama koje upotpunjavaju skup jednadžbi potrebnih za rješenje sustava.

U kontrolnom volumenu masa može biti samo unesena i iznesena fizičkim transportom, te proizvedena i konzumirana s kemijskom reakcijom. Te količine trebaju biti u ravnoteži jedna s drugom, a ukupni "efekt" se opisuje *akumulacijom mase*, što je ukupna promjena mase po jedinici vremena.

Ako je Ω dio kontinuuma, onda je njegova masa dana izrazom

$$m(\Omega) = \int_{\Omega} \rho d\mathbf{x},$$

gdje je ρ gustoća mase po jedinici volumena. Brzina promjene mase u Ω je stoga dana izrazom: $\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho d\mathbf{x}$. Za potrebu izraza brzine ulaska i izlaska mase iz kontrolnog volumena uvode se sljedeće oznake: Neka je \mathbf{n} jedinična vanjska normala na granicu kontrolnog volumena koja se označava sa $\partial\Omega$. Granica $\partial\Omega$ se može rastaviti na uniju $\partial\Omega = \partial\Omega^+ \cup \partial\Omega^-$, gdje je $\partial\Omega^+$ dio granice kroz koji masa napušta volumen, a $\partial\Omega^-$ kroz koji ulazi u volumen. Promatra li se komad ravne plohe orijentirane vektorom normale \mathbf{n} i površine S u fluidu koji se giba konstantnom brzinom \mathbf{v} , brzina mase koja prolazi kroz plohu je jednaka $\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} S$.

Slijedi da je brzina ulaska mase u Ω jednaka: $-\int_{\partial\Omega^-} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS$, a brzina izlaska mase iz Ω dana sa: $\int_{\partial\Omega^+} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS$.

Formulacija jednadžbe sačuvanja mase prikazana na mikroskali u integralnoj formi prima oblik:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = 0, \quad (2.1)$$

gdje je dS površinski element ruba domene. Za daljnji raspis ove jednadžbe se primjenjuje *Teorem o divergenciji*.

Teorem 2.1.1. (*Teorem o divergenciji*) Neka je $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ dovoljno glatka domena. Tada za svako glatko vektorsko polje \mathbf{F} vrijedi:

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{F} d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.2)$$

gdje je \mathbf{n} jedinična vektorska normala na $\partial\Omega$.

Primjenom jednadžbe (2.2) na (2.1), te zamjenom varijable $\mathbf{F} = \rho \mathbf{v}$ slijedi izraz:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \right) d\mathbf{x} = 0, \quad (2.3)$$

a kako je domena Ω proizvoljna, dobivamo *jednadžbu kontinuiteta*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (2.4)$$

Napomena. Dane jednadžbe vrijede na mikroskali, a potrebno ih je proširiti na makroskali.

2.2 Perspektiva na makroskali

U proučavanju porozne sredine je zastupljena makroskala, čija je karakteristična veličina reda od desetak do par stotina dijametara jedne pore. Pristup za dobivanje makroskopskih varijabli podrazumijeva usrednjavanje mikroskopskih varijabli na volumenu kojem želimo dobiti makroskopske veličine, tj. na REV-u. Sve makroskopske varijable su funkcije vremena i makroskopskih koordinata koje lociraju središte REV-a. Tako osim usrednjavanja varijabli, trebaju se usrednjiti i njihova vremenska te prostorne derivacije. Radi pojednostavljenja, u ovome radu se zanemaruje vremensko usrednjavanje. Za prostorno usrednjavanje se koristi teorem koji se oslanja na teorem o divergenciji.

Napomena. Ako fazu koju promatramo označimo sa α -faza, njen volumen unutar REV-a je označen sa $\delta\Omega^\alpha$. Granica α -faze sastoji se od dvije različite vrste površina. Prva je ploha između α -faze i ostalih faza te se nalazi u unutrašnjosti $\delta\Omega$, označena sa $S^{\alpha\beta}$, za $\alpha \neq \beta$. Drugi dio granice je na vanjskoj strani REV-a gdje je, matematički gledano, α -faza u kontaktu sa α -fazom, te se ta površina označava sa $\delta S^{\alpha\alpha}$.

Teorem 2.2.1. (Teorem prostornog usrednjavanja) Za svako dovoljno glatko vektorsko polje F :

$$\frac{1}{\delta\Omega} \int_{\delta\Omega^\alpha} \operatorname{div} F d\Omega_\xi = \operatorname{div}_x \left[\frac{1}{\delta\Omega} \int_{\delta\Omega^\alpha} F d\Omega_\xi \right] + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{1}{\delta\Omega} \int_{S^{\alpha\beta}} \mathbf{F}|_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha ds_\xi, \quad (2.5)$$

gdje je \mathbf{n}_α je jedinična vanjska normala α -faze u REV-u. Oznaka $\mathbf{F}|_\alpha$ predstavlja da je u sumaciji, preko svih ploha između α -faze i drugih faza, F evaluiran samo u α -fazi na plohi.

Kada promatramo tok fluida u porznoj sredini na makroskali, potrebno je uračunati prisutnost izvora i ponora fluida koji mogu doći od prisutnih utisnih i produkcijskih bušotina. Površina područja ponora je jako mala te se njegovo djelovanje promatra na točki makroskale. Unatoč tome, brzina protoka mase u toj točki je dovoljno velika te su količine fluida koji uđe, ili napusti sustav znatne.

U jednadžbama sačuvanja mase je stoga potrebno uračunati prijenos mase iz/u sustav kroz izvore i ponore. Makroskopska brzina α -faze, $\bar{\mathbf{v}}^\alpha$, u nekoj točki \mathbf{x} reprezentativnog volumena je dana formulom:

$$\bar{\mathbf{v}}^\alpha(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\Omega^\alpha(\mathbf{x})|} \int_{\Omega^\alpha(\mathbf{x})} \mathbf{v}^\alpha(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (2.6)$$

gdje je \mathbf{v}^α mikroskopska brzina α -faze. Sada podužim matematičkim izračunom koji se može pronaći u [7] dobivamo jednadžbu sačuvanja mase za α -fazu na makroskali:

$$\frac{\partial(\varepsilon^\alpha \rho^\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\varepsilon^\alpha \rho^\alpha \bar{\mathbf{v}}^\alpha) = \sum_{W=1}^{N_W} \rho_W^\alpha Q_W^\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^W), \quad (2.7)$$

gdje je N_W je broj ponora i izvora u sustavu, Q_W^α je volumen u jedinici vremena koji je ušao u α -fazu na lokaciji \mathbf{x}^W , $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^W)$ je Diracova delta funkcija na lokaciji \mathbf{x}^W .

Poglavlje 3

Darcyjev zakon

Svojstva fluida

Važna svojstva fluida su: gustoća (ρ), tlak (p), dinamička viskoznost (μ) te temperatura (T). Ove veličine je potrebno usrednjiti na REV-u zbog opisa fizikalnog procesa na makroskali. Također, iako ih definiramo kao svojstva fluida, ona nisu nezavisna jedna od drugih, a jednadžbe koje ih povezuju se zovu *jednadžbe stanja*. Jednadžbe stanja se obično izvode eksperimentalno, a primjenjive su na sustav koji se nalazi u ravnoteži, ili kada su odstupanja od ravnoteže "mala". Tako je eksperimentalno utvrđeno da gustoća fluidne α -faze ovisi o tlaku i temperaturi, a viskoznost fluida o tlaku.

Napomena. Mikroskopska dinamička viskoznost (μ) je koeficijent proporcionalnosti između posmičnog naprezanja i brze deformacije. Na makroskali bi μ^α bila prosjek od μ u α -fazi unutar REV-a. Ipak, ovako definirana makroskopska dinamička viskoznost ne predstavlja koeficijent proporcionalnosti između makroskopskog posmičnog naprezanja te makroskopske brzine deformacije. Stoga se za μ^α obično uzima vrijednost dinamičke viskozosti u slobodnom fluidu.

Napomena. Kako je čitav sustav u ravnoteži, makroskopska temperatura (T^α) se uzima za konstantu.

Uz dani opis makroskopskih svojstava fluida možemo prijeći na opis Darcyjevog zakona, osnovnog konstitutivnog zakona na makroskopskoj skali.

Opis Darcyjevog zakona. Propusnost

Istraživanja francuskog inženjera Henryja Darcyja su eksperimentalno dovela do Darcyevog zakona, ili Zakona filtracije [5]. Eksperimenti su uključivali potpuno ispunjen pije-

skom spremnik, duljine L i površine presjeka A , kroz koji je protjecala voda. Pritom su manometri bili priključeni na oba kraja promatranog spremnika.

Mjerena je brzina volumnog protoka vode, Q , te su promatrane razlike u piezometarskim razinama ($h = \frac{p}{\rho g} + z$) unutar manometra. Ako su izmjerene piezometarske razine na vrhu i dnu spremnika jednake, tj. $h_1 = h_2$, znači da nema protoka vode. Kada je $h_1 > h_2$ tok je nizvodan, a u slučaju $h_1 < h_2$ tok je uzvodan.

Eksperimenti su doveli do sljedećeg izraza:

$$Q = KA \frac{h_1 - h_2}{L}, \quad (3.1)$$

gdje je Q volumetrijski protok vode, a K *hidraulička vodljivost*. Hidraulička vodljivost je mjera lakoće s kojom fluid može prolaziti kroz porni prostor te je sigurno strogo veća od nule. Sada se izraz Q/A definira kao *Darcyjeva brzina*, \mathbf{q} .

Za poroznu sredinu se pretpostavlja da je *izotropna* ako je hidraulička vodljivost jednaka u svim smjerovima. Tada se tok fluida pojavljuje u smjeru gradijenta piezometarske razine, što je generalizacija izraza (3.1) te je $\mathbf{q} = -K\nabla h$. Raspisom slijedi:

$$\mathbf{q} = -\frac{K}{\rho g}(\nabla p + \rho g \vec{e}_3). \quad (3.2)$$

Iz Darcyjevih istraživanja je naposljetku izveden *Darcyjev zakon* dan jednadžbom:

$$\mathbf{q} = -\frac{1}{\mu} \mathbf{k}^s (\nabla p - \rho \mathbf{g}), \quad (3.3)$$

gdje je \mathbf{k}^s *intrinzična propusnost*.

Intrinzična propusnost je svojstvo porozne sredine dobiveno eksperimentalnim istraživanjima te je vezano uz hidrauličku vodljivost na sljedeći način:

$$K = \frac{\mathbf{k}^s \rho g}{\mu}. \quad (3.4)$$

Kako je intrinzična propusnost općenito simetričan pozitivno definitan tenzor, iz prethodne relacije slijedi da je i hidraulička vodljivost u najopćenitijem obliku simetričan pozitivno definitan tenzor. Nadalje, kako voda prolazi kroz spremnik ispunjen pijeskom, efektivna površina protoka je zapravo površina poprečnog presjeka A pomnožena s poroznosti ε . Brzina fluida je stoga dana izrazom:

$$\bar{\mathbf{v}} = \frac{Q}{\varepsilon A}, \quad (3.5)$$

što daje vezu makroskopske sa Darcyjevom brzinom:

$$\mathbf{q} = \varepsilon \bar{\mathbf{v}}. \quad (3.6)$$

Darcyjeva brzina stoga predstavlja *prividnu makroskopsku brzinu*.

Poglavlje 4

Dvofazni tok nemješivog fluida

Modeliranje toka dva nemješiva fluida zahtjeva da za svaku fazu imamo jednadžbu sačuvanja mase. Zasićenje fluida se mijenja "malo" kroz vrijeme, ali relativne količine svake faze se mogu znatnije mijenjati. Na primjer, jedna od faza može prvo u potpunosti ispunjavati prostor pora te onda iščeznuti.

Pretpostavlja se da w -faza vlaži krutu tvar, dok je n -faza nevlažeća. Kod nekih heterogenih krutina, jedna od faza fluida može biti vlažeća na jednom dijelu te nevlažeća na drugome, ali to se u ovome radu neće proučavati. Unutar REV-a, površina čvrste faze (s) može imati kontakt s obje fluidne faze. Svaka fluidna faza, uz interakciju s čvrstom fazom, djeluje i s drugom fluidnom fazom te se to djelovanje uzima u obzir pri opisivanju sustava.

Za dvofazni sustav, koristeći relaciju (1.3), jednadžbe sačuvanja mase primijenjene na w i n fazu su izražene redom jednadžbama:

$$\frac{\partial(s^w \varepsilon \rho^w)}{\partial t} + \operatorname{div}(s^w \varepsilon \rho^w \bar{\mathbf{v}}^w) = \sum_{W=1}^{N_W} \rho_W^w Q_W^w \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^W) \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial[(1 - s^w) \varepsilon \rho^n]}{\partial t} + \operatorname{div}[(1 - s^w) \varepsilon \rho^n \bar{\mathbf{v}}^n] = \sum_{W=1}^{N_W} \rho_W^n Q_W^n \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^W), \quad (4.2)$$

tj. generalni oblik za α -fazu je jednak:

$$\frac{\partial(s^\alpha \varepsilon \rho^\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(s^\alpha \varepsilon \rho^\alpha \bar{\mathbf{v}}^\alpha) = \sum_{W=1}^{N_W} \rho_W^\alpha Q_W^\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^W) \quad (4.3)$$

Koristeći jednadžbu (3.6), Darcyjeva brzina za α -fazu je dana kao $\mathbf{q}^\alpha = \varepsilon^\alpha \bar{\mathbf{v}}^\alpha$, a primjenom relacije (1.3) slijedi $\mathbf{q}^\alpha = s^\alpha \varepsilon \bar{\mathbf{v}}^\alpha$. Supstitucijom Darcyjeve brzine u (4.3), eliminira se

nepoznanica \mathbf{v}^α te generalni oblik jednadžbe sačuvanja mase za α -fazu poprima oblik:

$$\frac{\partial(s^\alpha \varepsilon \rho^\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho^\alpha \mathbf{q}^\alpha) = \sum_{w=1}^{N_w} \rho_w^\alpha Q_w^\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^w). \quad (4.4)$$

Unatoč tome što je Darcyjev zakon izveden za jednofazni tok, možemo pretpostaviti da u višefaznom toku svaki fluid reagira jednako. Uvodi se nova funkcija *relativna propusnost*, k_{rel}^α , koja ovisi o zasićenju (s^w) te vrijedi:

$$0 \leq k_{rel}^\alpha(s^w) \leq 1. \quad (4.5)$$

Kada su obje faze prisutne, suma relativnih propusnosti je često manja od 1. Također, ako dođe do smanjivanja jedne od faza njena relativna propusnost pada prema nuli. To odgovara činjenici da je faza mobilnija što je prisutnija u poroznoj sredini.

U nevlažećoj fazi, k_{rel}^n pokazuje histerezu, dok je ista u vlažećoj fazi zanemariva. Ovaj nedostatak histereze kod k_{rel}^w govori da tanki sloj vlažeće faze koji je ostao nakon ocjeđivanja može omogućiti bivšim putevima toka fluida da budu obnovljeni kada njegovo zasićenje poraste. S druge strane, činjenica da je k_{rel}^n veća kod ocjeđivanja w faze nego pri njenom vlaženju, implicira da se veći dio faze n prilikom vlaženja zarobi te se proces ponovnog povezivanja događa ubrzo nakon preokreta protoka. Za dano zasićenje, s^w , relativne propusnosti dviju faza nisu simetrične, odnosno: $k_{rel|1-s^w}^n > k_{rel|s^w}^w$. Do asimetrije dolazi jer se vlažeća faza preferencijalno nalazi u manjim porama.

Kao i funkcija kapilarnog tlaka, tako se i relativne propusnosti najčešće zadaju kao funkcije reduciranog zasićenja. Najpopularniji parametarski modeli koji se primjenjuju u sustavima voda-zrak su Brooks-Coreyev i van Genuchtenov. Van Genuchtenove relativne propusnosti su zadane formulama:

$$k_{rel}^w(s) = \sqrt{s^w} \left[1 - (1 - \overline{s^w}^{1/m})^n \right]^2, \quad (4.6)$$

$$k_{rel}^n(s) = \sqrt{1 - \overline{s^w}} \left[1 - \overline{s^w}^{1/m} \right]^{2n}, \quad (4.7)$$

gdje je $n=2, \dots, 5$ i $m=1-1/n$, dok su Brooks-Coreyevne relativne propusnosti dane formulama:

$$k_{rel}^w(s) = \overline{s^w}^{\frac{2+3l}{l}}, \quad (4.8)$$

$$k_{rel}^n(s) = (1 - \overline{s^w})^2 \left(1 - \overline{s^w}^{\frac{2+l}{l}} \right), \quad (4.9)$$

gdje je $l > 0$.

Darcyjev zakon za dvofazni tok je sada dan jednadžbama:

$$\mathbf{q}^w = -\frac{\mathbf{k}^{sw}}{\mu^w} (\nabla p_w - \rho^w \mathbf{g}), \quad (4.10)$$

$$\mathbf{q}^n = -\frac{\mathbf{k}^{sn}}{\mu^n}(\nabla p_n - \rho^n \mathbf{g}), \quad (4.11)$$

gdje je $\mathbf{k}^{s\alpha} = k_{rel}^\alpha \mathbf{k}^s$, $\alpha = w, n$. Razlika ovih jednadžbi i one za jednofazni tok je zamjena intrinzične propusnosti \mathbf{k}^s sa $\mathbf{k}^{s\alpha}$. Dodatna oznaka, α , označava ideju da će prividna intrinzična propusnost za svaku fazu u dvofaznom strujanju ovisiti i o svojstvima drugog fluida, te činjenici da njegova prisutnost smanjuje raspoloživi prostor za protok te faze.

S ovime je završen izvod generalnih jednadžbi modela dvofaznog toka nemješivog fluida:

$$\frac{\partial(s^w \varepsilon \rho^w)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho^w \mathbf{q}^w) = \sum_{W=1}^{N_W} \rho_W^w Q_W^w \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^W) \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial(s^n \varepsilon \rho^n)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho^n \mathbf{q}^n) = \sum_{W=1}^{N_W} \rho_W^n Q_W^n \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^W) \quad (4.13)$$

$$\mathbf{q}^w = -\frac{\mathbf{k}^{sw}}{\mu^w}(\nabla p_w - \rho^w \mathbf{g}) \quad (4.14)$$

$$\mathbf{q}^n = -\frac{\mathbf{k}^{sn}}{\mu^n}(\nabla p_n - \rho^n \mathbf{g}) \quad (4.15)$$

$$p_c(s^w) = p_n - p_w \quad (4.16)$$

$$s^w + s^n = 1 \quad (4.17)$$

4.1 Reformulacija modela

Za nestlačivi fluid, sustav jednadžbi (4.12)-(4.17) se reducira na sustav dvije parcijalne diferencijalne jednadžbe s dvije nezavisne nepoznanice p_n i s^w . Tada je $\rho^n = \rho^n(p_n)$, $\rho^w = \rho^w(p_w) = \rho^w(p_n - p_c(s^w))$, a ε može biti izražena preko varijabli p_n i $p_c(s^w)$. Dalje se koriste oznake $p = p_n$ i $S = s^w$.

Kada je porozna sredina kruta, $\varepsilon = \varepsilon(x)$, te kada su gustoća i viskoznost fluida konstantne, situacija se dodatno pojednostavljuje. Ako se u jednadžbama (4.12) i (4.13) desna strana definira redom s funkcijama $F_w(p, S)$, $F_n(p, S)$, tada one uz dana pojednostavljenja poprimaju oblik:

$$\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{q}^w = F_w(p, S) / \rho^w \quad (4.18)$$

$$-\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{q}^n = F_n(p, S) / \rho^n \quad (4.19)$$

Totalna brzina, \mathbf{q}^t , se definira kao zbroj Darcyjevih brzina vlažeće i nevlažeće faze, tj. $\mathbf{q}^t = \mathbf{q}^w + \mathbf{q}^n$. Koristeći (4.17) za totalnu brzinu slijedi:

$$\operatorname{div} \mathbf{q}^t = F_w / \rho^w + F_n / \rho^n \quad (4.20)$$

Uvrštavanjem jednadžbi (4.14) i (4.15) u (4.18) te (4.19) imamo:

$$\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \left(-\frac{\mathbf{k}^{sw}}{\mu^w} (\nabla p_w - \rho^w \mathbf{g}) \right) = F_w / \rho^w \quad (4.21)$$

$$-\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \left(-\frac{\mathbf{k}^{sn}}{\mu^n} (\nabla p - \rho^n \mathbf{g}) \right) = F_n / \rho^n \quad (4.22)$$

Zbog jednostavnijeg zapisa se uvode *mobilnosti* fluida. Mobilnosti fluida su funkcije:

$$\lambda_w(S) = \frac{k_{rel}^w(S)}{\mu^w}, \quad \lambda_n(S) = \frac{k_{rel}^n(S)}{\mu^n}, \quad (4.23)$$

a ukupna mobilnost je:

$$\lambda(S) = \lambda_w(S) + \lambda_n(S). \quad (4.24)$$

Uz dana pojednostavljenja, zbroj jednadžbi (4.21) i (4.22) daje eliptičku *jednadžbu tlaka*:

$$\operatorname{div}[\mathbf{k}^s (\lambda_w (\nabla p_c + \rho^w \mathbf{g}) + \lambda_n \rho^n \mathbf{g} - \lambda \nabla p)] = F_w / \rho^w + F_n / \rho^n, \quad (4.25)$$

dok se jednadžba (4.21) pretvara u paraboličku *jednadžbu zasićenja*, tipa konvekcija-difuzija:

$$\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{k}^s \lambda_w (\rho^w \mathbf{g} - \nabla(p - p_c))) = F_w / \rho^w. \quad (4.26)$$

Model dvofaznog toka nemješivog fluida je sada dan sustavom (4.25) i (4.26).

4.2 Izvod Buckley-Leverettove jednadžbe

Jedan od pristupa modeliranja dvofaznog nemješivog fluida koristi posebna pojednostavljenja koja vode Buckley-Leverettovoj jednadžbi. Glavna stavka ovog pristupa je ta što se problem formulira u terminima toka jedne faze (vlažeće), dok dinamika druge faze (nevlažeće) nije potpuno zanemarena. Tok fluida se promatra u jednoj prostornoj dimenziji te se domena toka nalazi u horizontali. Za intrinzičnu permeabilnost se stoga uzima da je konstantna skalarna vrijednost. Pretpostavljamo da u sustavu nema izvora niti ponora.

Definicija. Djelomični tok f_α , $\alpha \in \{w, n\}$, je funkcija koja određuje frakcijski volumetrijski protok jedne faze pod danim gradijentom tlaka u prisutnosti druge faze, izražen kao:

$$f_w(s^w) = \frac{\lambda_w(s^w)}{\lambda(s^w)}, \quad f_n(s^w) = \frac{\lambda_n(s^w)}{\lambda(s^w)}.$$

Derivacija jednadžbe zahtjeva da se razmotre djelomični doprinosi Darcyjevoj brzini od svake faze. Nakon toga će se koncept djelomičnog toka koristiti u izvedbi Buckley-Leverettove jednadžbe. U osnovi, Buckley-Leverettova jednadžba je prikaz jednadžbe toka za fazu vlaženja u obliku udjela svake brzine faze koja doprinosi toku.

Za tok u horizontali, Darcyjev zakon za w i n faze je dan jednadžbama:

$$q^w = -\frac{k^s k_{rel}^w}{\mu^w} \frac{\partial p_w}{\partial x} \quad (4.27)$$

$$q^n = -\frac{k^s k_{rel}^n}{\mu^n} \frac{\partial p_n}{\partial x} \quad (4.28)$$

Iz jednadžbe (4.27) se može eliminirati tlak koristeći relaciju $p_w = p_n - p_c$,

$$q^w = -\frac{k^s k_{rel}^w}{\mu^w} \left(\frac{\partial p_n}{\partial x} - \frac{\partial p_c}{\partial x} \right). \quad (4.29)$$

Sljedeće se eliminira $\frac{\partial p_n}{\partial x}$ u jednadžbama (4.27) i (4.28) tako da se dobije izraz:

$$\frac{1}{k^s} \left(\frac{q^w \mu^w}{k_{rel}^w} - \frac{q^n \mu^n}{k_{rel}^n} \right) = \frac{\partial p_c}{\partial x}. \quad (4.30)$$

Sada je ukupna brzina u horizontali dana zbrojem Darcyjevih brzina za svaku fazu, a označava se sa

$$q^t = q^w + q^n. \quad (4.31)$$

Uz pretpostavku da je kapilarni tlak jednak nuli, djelomični tok α -faze je dan relacijom:

$$q^\alpha = f^\alpha q^t. \quad (4.32)$$

Kako pojednostavljeni sustav ne sadrži izvore i ponore, jednadžbe sačuvanja mase za vlažću i nevlažću fazu na makroskali u horizontali su jednake:

$$\frac{\partial(s^w \varepsilon \rho^w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho^w q^w)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial(s^n \varepsilon \rho^n)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho^n q^n)}{\partial x} = 0. \quad (4.33)$$

Za ukupnu brzinu slijedi da zadovoljava jednadžbu $\partial q^t / \partial x = 0$ te je stoga $q^t = q^t(t)$. Zavisnost totalne brzine o vremenu je posve određena rubnim uvjetom pa je totalna brzina time

u potpunosti određena. U nastavku se promatra slučaj kada je totalna brzina konstantna. Ako se varijable ε i ρ^w također pretpostave konstantnima, za $\alpha = w$ supstitucija jednačbe (4.32) u prvu jednačbu od (4.33) daje:

$$\frac{\varepsilon}{q^t} \frac{\partial s^w}{\partial t} + \frac{\partial f^w}{\partial x} = 0, \quad (4.34)$$

Iz čega korištenjem pravila ulančavanja slijedi Buckley-Leverettova jednačba:

$$\frac{\varepsilon}{q^t} \frac{\partial s^w}{\partial t} + \frac{df^w}{ds^w} \frac{\partial s^w}{\partial x} = 0, \quad (4.35)$$

koja predstavlja primjer nelinearnog hiperboličkog zakona sačuvanja.

Prilikom numeričkog rješavanja parcijalnih diferencijalnih jednačbi hiperboličkog tipa, za uvjet konvergencije se često koristi Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) uvjet. Preciznije, upotrebljava se kod primjene eksplicitnih shema za rješavanje vremenske integracije u numeričkoj analizi. Princip koji stoji iza CFL uvjeta je da, na primjer, ako se val kojem želimo izračunati amplitudu u ekvidistantnim diskretnim vremenskim koracima, kreće preko diskretne prostorne mreže, tada to trajanje kretanja mora biti manje od vremena putovanja vala na susjedne točke mreže.

4.3 Rubni uvjeti

Matematički model do sada opisan nije u potpunosti završen bez postavljenih rubnih i početnih uvjeta. Stoga, neka je $\partial\Omega$ granica porozne sredine, koja može biti sastavljena od disjunktnih dijelova $\Gamma_i, i = 1, 2, \dots, n$ u slučaju različitih rubnih uvjeta na različitim dijelovima granice. Tada je

$$\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \dots \cup \Gamma_n, \quad \Gamma_i \cap \Gamma_j = \emptyset \quad \text{za } i \neq j.$$

Ukoliko na dijelu granice zadajemo vrijednosti dviju nezavisnih varijabli, npr. p_n i s^w , tada smo zadali Dirichletov rubni uvjet.

Za nepropusni dio granice se zadaje Neumannov rubni uvjet u obliku:

$$\mathbf{q}_w \cdot \mathbf{n} = 0,$$

$$\mathbf{q}_n \cdot \mathbf{n} = 0,$$

gdje je \mathbf{n} vanjska jedinična normala na rub domene.

Neumannov rubni uvjet se također zadaje ako je kroz dio granice poznat protok obje faze:

$$\rho^w \mathbf{q}_w \cdot \mathbf{n} = g_w,$$

$$\rho^n \mathbf{q}_n \cdot \mathbf{n} = g_n,$$

gdje su g_w i g_n poznate vrijednosti.

Napomena. Rubni uvjeti Dirichletovog i Neumannovog tipa se mogu po prilici i kombinirati. Na primjer, pri infiltraciji vode u podzemlje kroz površinu zemlje može nam biti poznata brzina ulaska vode u tlo, dok se za tlak pretpostavi da je atmosferski.

Za razmotriti je ostao još dio granice gdje fluidi ulaze, ili izlaze iz porozne sredine, a zove se granica porozne sredine. Rubni uvjeti na tome dijelu zahtijevaju da tlakovi obiju faza budu neprekidni, a ako samo jedan fluid prolazi kroz granicu taj je uvjet odmah zadovoljen. Kako su izvan porozne sredine oba fluida pod istim tlakom, da bi fluidi mogli istovremeno prolaziti kroz granicu porozne sredine potrebno je da njihov kapilarni tlak na tome rubu bude jednak nuli, što određuje zasićenje. Zasićenje u kojem se kapilarni tlak poništava je $s^{wc} = 1 - s^{nr}$ pa konačni rubni uvjet poprima oblik:

$$s^w < s^{wc} \Rightarrow (\rho^w \mathbf{q}_w \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ ili } \rho^n \mathbf{q}_n \cdot \mathbf{n} = 0).$$

Ukoliko je granica porozne sredine ulazna promatramo slučaj utiskivanja fluida. Utiskivanje vlažećeg fluida je opisano Neumannovim rubnim uvjetom:

$$\rho^w \mathbf{q}_w \cdot \mathbf{n} = g_w < 0,$$

$$\rho^n \mathbf{q}_n \cdot \mathbf{n} = 0,$$

te slično za utiskivanje nevlažećeg fluida imamo:

$$\rho^w \mathbf{q}_w \cdot \mathbf{n} = 0,$$

$$\rho^n \mathbf{q}_n \cdot \mathbf{n} < g_n.$$

Konačno, ako je domena inicijalno zasićena nevlažećim fluidom, onda za rubni uvjet na izlaznoj granici stavljamo Dirichletov rubni uvjet: $s^w = 0$. Ovaj uvjet prestaje vrijediti kada kroz izlaznu granicu krene izlaziti vlažeći fluid. U suprotnome, ako je domena inicijalno zasićena vlažećim fluidom, prikladni Dirichletov uvjet na izlaznoj granici je dan sa: $s^w = s^{wc}$. U situaciji kada kroz izlaznu granicu istovremeno izlaze obje faze, nužan je uvjet $s^w = s^{wc}$. Dok je $s^w < s^{wc}$ vlažeći fluid se nakuplja na granici, ali ne prolazi kroz nju. Kada je postignuto kritično zasićenje može početi izlaziti zajedno s nevlažećim fluidom, a to je opisano unilateralnim rubnim uvjetom:

$$s^w \leq s^{wc}, \quad \mathbf{q}_w \cdot \mathbf{n} \geq 0, \quad (s^{wc} - s^w)(\mathbf{q}_w \cdot \mathbf{n}) = 0.$$

Poglavlje 5

Numerički postupak rješavanja modela

Numerička metoda za rješavanje sustava parcijalnih diferencijalnih jednadžbi uključuje diskretizaciju problema, koji ima beskonačno mnogo stupnjeva slobode, kako bi se došlo do diskretnog problema, koji ima konačno mnogo stupnjeva slobode i može biti kompjuterski riješen. Postoje implicitni i eksplicitni načini rješavanja problema, a u ovome radu će se primijeniti oba pristupa za rješavanje sustava parcijalnih diferencijalnih jednadžbi (PDJ) drugog reda.

5.1 Metoda konačnih volumena

Prvi korak u rješavanju modela strujanja fluida je izbor i generacija mreže na prostornoj domeni. Ovaj korak je među najvažnijima jer nepravilan izbor mreže direktno utječe na kvalitetu dobivenih rezultata. Najčešće korištene metode su: Metoda konačnih volumena te Metoda konačnih elemenata, a u ovoj sekciji se opisuje prva. Mrežu stoga čine kontrolni volumeni, a sve diskretne vrijednosti unutar volumena se računaju u njegovom centru. Jer se na svakom kontrolnom volumenu nepoznata funkcija aproksimira konstantnom, konačna aproksimacija je po dijelovima konstantna funkcija.

Dva volumena su susjedna ako dijele zajedničku stranicu (ili dio stranice), ali ne i kada dijele samo zajednički brid (za $d = 3$) ili zajednički vrh. Budući da je tok koji ulazi u zadani volumen identičan onome koji izlazi iz susjednog volumena, metoda je konzervativna. *Prenosivost*, t , između dva susjedna konačna volumena mjeri kojom lakoćom fluid prolazi između njih.

Za domenu $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \{2, 3\}$ s granicom $\Gamma = \partial\Omega$, opis Metode konačnih volumena će

se izvesti nad eliptičkim problemom:

$$\begin{cases} \operatorname{div}(-\Lambda \nabla u) = q, & \text{u } \Omega \\ (-\Lambda \nabla u) \cdot \mathbf{n} = v_N, & \text{na } \Gamma_N \\ u = u_D, & \text{na } \Gamma_D, \end{cases} \quad (5.1)$$

gdje je $\Lambda = \Lambda(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ simetrični, pozitivno definitni tenzor drugog reda (npr. propusnost), $u = u(\mathbf{x})$ nepoznanica te $q = q(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ prijenos mase kroz izvore i ponore. Mreža \mathcal{M} je rezultat podjele domene Ω na n_ϵ kontrolnih volumena $K \subset \Omega$ te vrijedi $\bar{\Omega} = \cup_{K \in \mathcal{M}} \bar{K}$. Za sve različite volumene K, L vrijedi $K \cap L = \emptyset$.

Sada je potrebno integrirati prvu jednadžbu iz (5.1) preko kontrolnog volumena K te primijeniti Teorem o divergenciji:

$$\int_{\partial K} (-\Lambda \nabla u) \cdot \mathbf{n} dS = \int_K q dx, \quad (5.2)$$

gdje je \mathbf{n} je vanjska jedinična normala na ∂K . Kvaliteta aproksimacije integrala ovisi o finoći mreže, odnosno veličini i broju konačnih volumena te o korištenima shemama diskretizacije relevantnih fizikalnih veličina. Rezultat diskretizacije je prevođenje skupa diferencijalnih jednadžbi u velik broj algebarskih jednadžbi.

Granica kontrolnog volumena ∂K se dijeli na konačan broj dijelova $\sigma \subset \partial K$ t.d. $\sigma = \bar{K} \cap \bar{L}$, gdje je L susjedni volumen. Zamjenom fluksova za njihove aproksimacije, tj. $F_{K,\sigma} \approx \int_{\sigma} (-\Lambda_K \nabla u) \cdot \mathbf{n} d\Gamma$, gdje je Λ_K vrijednost od Λ unutar kontrolnog volumena K , iz (5.2) slijedi:

$$\sum_{\sigma \subset \partial K} F_{K,\sigma} = \operatorname{vol}(K) q_K, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad (5.3)$$

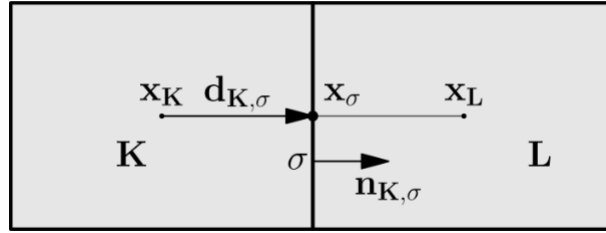
gdje je $F_{K,\sigma}$ diskretni fluks koji prolazi kroz dio granice (σ), a q_K srednja vrijednost funkcije q na volumenu K . Ova jednadžba predstavlja tipičnu formulaciju za Metodu konačnih volumena, a sheme se razlikuju u aproksimacijama člana $(\Lambda_K \nabla u) \cdot \mathbf{n}$. Ovdje ćemo spomenuti dvije aproksimacije: TPFA (Two-point flux approximation) i MPFA-O (Multi-point flux approximation).

Zbog simetričnosti tenzora Λ_K , izraz $(\Lambda_K \nabla u) \cdot \mathbf{n}$ se može zapisati kao $\nabla u \cdot \Lambda_K \mathbf{n}$, što odgovara usmjerenoj derivaciji od u u konormalnom smjeru. TPFA metoda koristi dekompoziciju konormale, tj.:

$$\Lambda_K \mathbf{n}_{K,\sigma} = t_{K,\sigma} \mathbf{d}_{K,\sigma} + \mathbf{d}_{K,\sigma}^\perp, \quad t_{K,\sigma} = \frac{\mathbf{n}_{K,\sigma}^T \Lambda_K \mathbf{d}_{K,\sigma}}{\mathbf{d}_{K,\sigma}^T \mathbf{d}_{K,\sigma}},$$

$$\mathbf{d}_{K,\sigma} = \Lambda_K \mathbf{n}_{K,\sigma} - t_{K,\sigma} \mathbf{d}_{K,\sigma}, \quad (5.4)$$

gdje je $t_{K,\sigma}$ prenosivost kroz σ , $\mathbf{d}_{K,\sigma} = \mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_K$ te $\mathbf{d}_{K,\sigma}^T \mathbf{d}_{K,\sigma}^\perp = 0$. Slično se radi i za konormalu $\Lambda_L \mathbf{n}_{L,\sigma}$, gdje je L kontrolni volumen.



Slika 5.1: Susjedni volumeni K i L sa presjekom σ

Koristeći uvedene notacije, za svaki K i σ sada vrijedi:

$$\nabla u \cdot \Lambda_K \mathbf{n}_{K,\sigma} = t_{K,\sigma} \nabla u \cdot \mathbf{d}_{K,\sigma} + \nabla u \cdot \mathbf{d}_{K,\sigma}^\perp \quad (5.5)$$

U TPFA shemi se ortogonalni član s desne strane zanemaruje, a to rezultira gubljenjem konzistencije kod mreža koje nemaju stranice u smjeru koordinatnih osi. Koristeći aproksimaciju $\nabla u \cdot \mathbf{d}_{K,\sigma} \approx u_\sigma - u_K$, diskretni fluksevi za stranicu σ s površinom $m(\sigma)$ su dani sljedećim jednažbama:

$$F_{K,\sigma} = -m(\sigma)t_{K,\sigma}(u_\sigma - u_K), \quad F_{L,\sigma} = -m(\sigma)t_{L,\sigma}(u_\sigma - u_L). \quad (5.6)$$

Primjenom konzervativnosti lokalnih flukseva, tj. $F_{K,\sigma} + F_{L,\sigma} = 0$, slijedi:

$$u_\sigma = \frac{t_{K,\sigma}u_K + t_{L,\sigma}u_L}{t_{K,\sigma} + t_{L,\sigma}}. \quad (5.7)$$

Sada se (5.6) može zapisati kao:

$$F_{K,\sigma} = m(\sigma) \frac{t_{K,\sigma}t_{L,\sigma}}{t_{K,\sigma} + t_{L,\sigma}} (u_K - u_L), \quad F_{L,\sigma} = m(\sigma) \frac{t_{K,\sigma}t_{L,\sigma}}{t_{K,\sigma} + t_{L,\sigma}} (u_L - u_K). \quad (5.8)$$

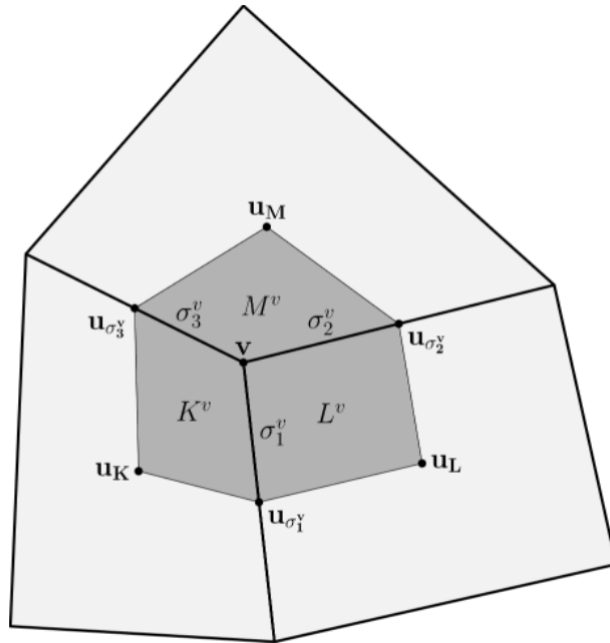
Diskretni fluksevi poprimaju općeniti oblik:

$$F_{K,\sigma} = \sum_{N \in \mathcal{S}_{K,\sigma}} t_{K,\sigma}^N u_N, \quad (5.9)$$

gdje je $\mathcal{S}_{K,\sigma}$ skup svih susjednih volumena od K , a za prenosivosti vrijede sljedeći odnosi:

$$t_{K,\sigma}^K = m(\sigma) \frac{t_{K,\sigma}t_{L,\sigma}}{t_{K,\sigma} + t_{L,\sigma}}, \quad t_{K,\sigma}^L = -m(\sigma) \frac{t_{K,\sigma}t_{L,\sigma}}{t_{K,\sigma} + t_{L,\sigma}}. \quad (5.10)$$

Ako je zbog neortogonalnosti mreže zadnji član u (5.5) različit od nule, za aproksimaciju fluksova koristi se metoda MPFA. U ovoj shemi, dualna mreža se stvara povezivanjem baricentara ćelija s baricentrima ruba volumena (za $d = 2$), ili s baricentrima rubova i vrhova volumena (za $d = 3$). Ovako se svaki kontrolni volumen dijeli na podkontrolne volumene K^v (Slika 5.2). Analogno, svaki rub volumena se dijeli na podrubove σ^v . Dalje se opisuje samo dvodimenzionalni slučaj.



Slika 5.2: Dio mreže četverokuta te područja koja se koriste za rekonstrukciju gradijenta

Generalizacija u odnosu na TPFA metodu se sastoji u tome da pretpostavimo kako je rješenje u svakom subkontrolnom volumenu afina funkcija. Stoga je konačno rješenje po dijelovima konstantna funkcija te je potrebno zamijeniti pravi gradijent. Diskretni gradijent od subkontrolnog volumena K^v , u oznaci: $\nabla_{\mathcal{D}}^{K^v} u$, je konstruiran tako da konačna shema bude konzistentna:

$$\nabla_{\mathcal{D}}^{K^v} u = \mathbb{D}_{K^v}^{-1} \begin{bmatrix} u_{\sigma_1^v} - u_K \\ u_{\sigma_3^v} - u_K \end{bmatrix}, \quad \text{za} \quad \mathbb{D}_{K^v} = [\mathbf{x}_{\sigma_1^v} - \mathbf{x}_K \quad \mathbf{x}_{\sigma_3^v} - \mathbf{x}_K]^T, \quad (5.11)$$

a jer je konstantan po subvolumenu mora zadovoljavati uvjete:

$$\nabla_{\mathcal{D}}^{K^v} u \cdot (\mathbf{x}_{\sigma_1^v} - \mathbf{x}_K) = u_{\sigma_1^v} - u_K, \quad \nabla_{\mathcal{D}}^{K^v} u \cdot (\mathbf{x}_{\sigma_3^v} - \mathbf{x}_K) = u_{\sigma_3^v} - u_K. \quad (5.12)$$

Diskretni fluks preko σ_1^v iz volumena K sada postaje:

$$F_{K,\sigma_1^v} = -m(\sigma_1^v)\Lambda_K\nabla_{\mathcal{D}}^{K^v}u \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma_1^v}. \quad (5.13)$$

Uvrštavanjem diskretnog gradijenta slijedi:

$$F_{K,\sigma_1^v} = m(\sigma_1^v)\mathbb{D}_{K^v}^{-T}\Lambda_K\mathbf{n}_{K,\sigma_1^v} \cdot \mathbf{e}_1(u_K - u_{\sigma_1^v}) + m(\sigma_1^v)\mathbb{D}_{K^v}^{-T}\Lambda_K\mathbf{n}_{K,\sigma_1^v} \cdot \mathbf{e}_2(u_K - u_{\sigma_3^v}), \quad (5.14)$$

Na analogan način se aproksimiraju i ostali fluksevi te dobivamo jednadžbe koje opisuju konzervativnost sheme:

$$\begin{cases} F_{K,\sigma_1^v} + F_{L,\sigma_1^v} = 0, \\ F_{K,\sigma_3^v} + F_{M,\sigma_3^v} = 0, \\ F_{L,\sigma_2^v} + F_{M,\sigma_2^v} = 0. \end{cases} \quad (5.15)$$

Time dobivamo linearan sustav dimenzije 3×3 , oblika $\mathbf{A}\mathbf{u}_{\sigma_1^v} = \mathbf{B}\mathbf{u}$, gdje su $\mathbf{u}_{\sigma} = [\mathbf{u}_{\sigma}, \mathbf{u}_{\sigma_2^v}, \mathbf{u}_{\sigma_3^v}]^T$ novo uvedene nepoznanice (koje se sada mogu eliminirati), te se fluks može u potpunosti izraziti preko varijable $\mathbf{u} = [u_K, u_L, u_M]^T$.

Box metoda

Jedna od verzija Metode konačnih volumena je Box metoda, ili Metoda konačnih volumena centrirana u vrhovima. Ona spaja prednosti Metode konačnih volumena (MKV) te Metode konačnih elemenata (MKE). Opis metode će se izvršiti nad jednadžbom (5.2), za $d=2$.

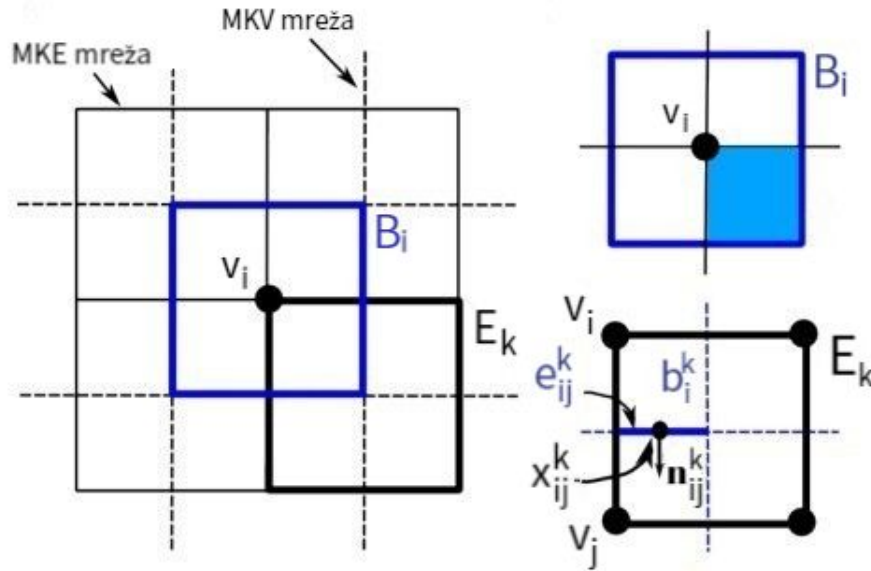
Domena Ω je prvo diskretizirana na pripadnu MKE mrežu, koja se sastoji od čvorova v_i te elemenata E_k [2]. Zatim se oko svakog vrha v_i , spajanjem centara elemenata koji sadrže v_i s polovištima stranica koje izlaze iz vrha v_i , stvara kontrolni volumen B_i . Kontrolni volumeni konstruirani na ovaj način čine jednu mrežu domene te *dualnu* mrežu na domeni Ω (Slika 5.3). MKE mreža dijeli kontrolni volumen B_i na subkontrolne volumene b_i^k , a \mathcal{T}_i označava skup svih subkontrolnih volumena čvora v_i . Sa e_{ij}^k je označen presjek volumena b_i^k te b_j^k , a $|e_{ij}^k|$ je dužina pripadnog dijela granice subkontrolnog volumena. Za svaki i , skup svih e_{ij}^k se označava s \mathcal{E}_i .

Za svaki vrh v_i unutar mreže sada vrijedi:

$$-\sum_{e_{ij}^k \in \mathcal{E}_i} \int_{e_{ij}^k} \Lambda \nabla u \cdot \mathbf{n}_{ij}^k dS = \sum_{L \in \mathcal{T}_i} \int_L q dx, \quad (5.16)$$

gdje je \mathbf{n}_{ij}^k jedinična vanjska normala na stranicu e_{ij}^k .

Potrebno je primijetiti da u formulaciji (5.16) stranice subkontrolnih volumena prolaze


 Slika 5.3: Diskretizacija box metode, $d=2$ [2]

kroz unutrašnjost elemenata primarne mreže, a ne po njihovim granicama. Za konstantni koeficijent Λ po elementima primarne mreže, na stranici $e_{ij}^k \subset E_k$ imamo:

$$\int_{e_{ij}^k} \Lambda \nabla u \cdot \mathbf{n}_{ij}^k dS = \Lambda_K \nabla u|_K \cdot \mathbf{n}_{ij}^k |e_{ij}^k|, \quad (5.17)$$

gdje smo iskoristili da je $\nabla u|_K$ poznat na svakom elementu E_k i računa se iz raspisa rješenja po baznim funkcijama. U slučaju simplicijalne (trokutaste) mreže taj je gradijent konstantan, a u slučaju pravokutne mreže on se može aproksimirati svojom vrijednošću u centru stranice. Također, vrijedi da je svojstvo konzervativnosti aproksimativnog fluksa trivijalno zadovoljeno.

Integral s desne strane u formulaciji (5.16) se sada aproksimira na sljedeći način:

$$\sum_{L \in T_i} \int_L q dx \approx \text{vol}(B_i) q(i), \quad (5.18)$$

čime je završena aproksimacija jednadžbe (5.2).

Box metoda reprezentira rješenje pomoću \mathbb{P}_1 elemenata na simpleksima ili \mathbb{Q}_1 elemenata na četverokutima i heksaedrima. Konačno rješenje je stoga na primarnoj mreži reprezentirano kao neprekidna funkcija.

5.2 IMPES algoritam

Najpoznatija metoda rješavanja dvofaznog nemješivog toka je IMPES algoritam (IMplicit Pressure Explicit Saturation). Osnovna ideja ove klasične metode je odvajanje izračuna tlaka od izračuna zasićenja [1]. Tako se u svakom vremenskom koraku jednačba tlaka rješava prva implicitnim pristupom, a zatim jednačba zasićenja eksplicitno koristeći dobivene vrijednosti tlaka:

$$\operatorname{div}[\mathbf{k}^s(\lambda_w(S^n)(\nabla p_c(S^n) + \rho^w \mathbf{g}) + \lambda_n(S^n)\rho^n \mathbf{g} - \lambda(S^n)\nabla p^{n+1})] = F_w(p^{n+1}, S^n)/\rho^w + F_n(p^{n+1}, S^n)/\rho^n \quad (5.19)$$

$$\varepsilon \frac{\partial S^n}{\partial t^n} + \operatorname{div}(\mathbf{k}^s \lambda_w(S^n)(\rho^w \mathbf{g} - \nabla(p^{n+1} - p_c(S^n))) = F_w(p^{n+1}, S^n)/\rho^w \quad (5.20)$$

gdje n u eksponentu varijabli S , p označava n -ti vremenski sloj na kojem se rješavaju jednačbe. Metoda je učinkovita te zahtjeva manje memorije računala od drugih pristupa. Glavna pretpostavka je da će gradijent kapilarnog tlaka biti dovoljno malen te se stoga neće mijenjati puno kroz vrijeme.

Za prostornu diskretizaciju jednačbi (5.19) te (5.20) se primjenjuje neka od metoda konačnih volumena. Dobiveni sustav će biti spreman za rješavanje tek nakon aproksimacije vremenske derivacije zasićenja vlažeće faze. Vremenska diskretizacija uključuje podjelu promatranog intervala $J = (0, T]$, $T > 0$, na neku njegovu particiju. Preciznije, za pozitivan broj N , $0 = t^0 < t^1 < \dots < t^N = T$ je jedna particija vremenskog intervala J . Sada aproksimacija člana $\varepsilon \partial S^n / \partial t^n$ u vremenu t^n diferencijom unazad iznosi:

$$\varepsilon \frac{\partial S^n}{\partial t^n} = \varepsilon \frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t^n}, \quad (5.21)$$

gdje je Δt^n dužina n -tog vremenskog koraka.

Klasični IMPES algoritam prvo određuje inicijalne uvjete nepoznanica p^0 i S^0 u svakome čvoru mreže. Vremenski korak je varijabilan te se odabire netom prije računanja zasićenja, a ovisi o Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) uvjetu. Dalje se na svakom kontrolnom volumenu, uz dato zasićenje S^n , p^{n+1} računa implicitno iz linearnog sustava jednačbi za tlak, a nakon njega se novo zasićenje S^{n+1} eksplicitnom metodom dobiva iz jednačbe za zasićenje. Treba pripaziti da prilikom računanja vremenski korak bude dovoljno malen jer stabilnost eksplicitno dobivenog zasićenja ovisi o njemu.

Česta izračunavanja implicitnog sustava mogu znatno povećati vrijeme potrebno za izračun konačnog rješenja. Kako je za stabilnost eksplicitne metode bitan mali vremenski korak, a implicitna metoda je stabilna neovisno o njemu, moguće je odvojiti vremenske korake potrebne za rješavanje jednačbi. Stoga se za izračun tlaka koriste veći vremenski koraci, a za izračun zasićenja manji. U ovakvome algoritmu nakon što se zasićenje izračunalo eksplicitno, onoliko puta koliko njegovi vremenski koraci stanu u vremenski korak određen za izračun tlaka, tlak se može opet računati s novim zasićenjem.

Poglavlje 6

Numeričke simulacije

DuMu^x je programska biblioteka za simulaciju toka fluida i transporta supstanci kroz poroznu sredinu. Tehnički gledano DuMuX je modul biblioteke Dune koja predstavlja jedan programski okvir za simulacije inicijalno rubnih zadaća za parcijalne diferencijalne jednačbe. Prikazane simulacije su napravljene s verzijom 3.2 DuMu^x biblioteke. Korištena dvodimenzionalna strukturirana mreža za računanje rješenja je svugdje bila: *YaspGrid*.

6.1 Primjer 1

Dvofazni nemješivi tok dan sustavom (4.12)-(4.17) označavamo sa $2p$. Za vlažeću fazu je zadana nestlačiva voda, a nevlažeću trikloretlen (C_2HCl_3). Obje faze su tekuće te nestlačive. Trikloretlen je industrijsko otapalo te predstavlja primjer tekućine koja se ne miješa i ne otapa u vodi, a ima gustoću mase veću od vode. Takve su tekućine potencijalni загаđivači podzemnih voda i obično se nazivaju DNAPL (eng. Dense Non-Aqueous Phase Liquid).

Reformulacijom jednačbi sustav se može svesti na dvije parcijalne diferencijalne jednačbe s nepoznicama: p_n, s^w , ili p_w, s^n . U DuMu^x-u su kao nepoznanice zadani p_w i s^n , ali se to može promijeniti u kodu.

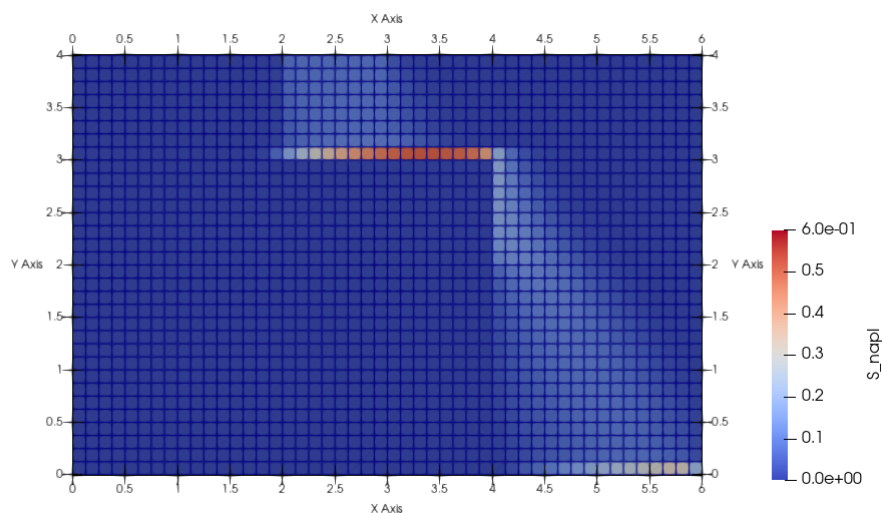
Promatramo $2p$ izotermalni model pa je temperatura konstantna varijabla te postavljena na: 293.15K (20°C). Također, za poroznost je uzeta vrijednost $\varepsilon = 0.4$, a gustoće su postavljene na $\rho^w = 1000$ [kg/m³], $\rho^n = 1460$ [kg/m³].

Za domenu je uzet pravokutnik dimenzija 6m x 4m, $\Omega = (0, 6) \times (0, 4)$, te je sredina inicijalno u potpunosti zasićena vlažećom fazom. Hidrostatski tlak se, ovisno o poziciji unutar domene, inicijalno nalazi u intervalu [100613 Pa, 138627 Pa]. Na vertikalnim stranama domene su postavljeni Dirichletovi uvjeti za hidrostatski tlak, te zasićenje $s^n = 0$. Nevlažeći fluid se utiskuje na gornjoj strani pravokutnika između $2m \leq x \leq 3m$ s brzinom

0.04 [kg/(m²*s)]. Ostatak gornje granice te donja su nepropusne pa je zadan homogeni Neumannov rubni uvjet. Za krivulju kapilarnog tlaka je uzeta regularna Van Genuchtenova krivulja. Također, domena je nehomogena te se unutar samog pravokutnika nalazi blok, na poziciji (1,4)x(2,3), koji ima drugačije parametre kapilarne krivulje od materijala van njega.

Parametri za Van Genuchtenovu kapilarnu krivulju van bloka su: $\alpha = 0.0037$, $n = 4.7$. Rezidualna zasićenja van bloka su: $s^{wr} = 0.05$, $s^{nr} = 0$, te je propusnost materijala jednaka: $4.6e-10$ [m²]. S druge strane, parametri za Van Genuchtenovu kapilarnu krivulju unutar bloka su: $\alpha = 0.00045$, $n = 7.3$. Za rezidualna zasićenja vrijedi: $s^{wr} = 0.18$, $s^{nr} = 0$, te je propusnost materijala unutar bloka nešto manja: $K = 9.05e-12$ [m²].

Jednadžbe za tlak i zasićenje se sada diskretiziraju nekom od metoda konačnih volumena za prostornu diskretizaciju te implicitnom Eulerovom metodom za vremensku diskretizaciju. Početni vremenski korak je $Dt_{Initial} = 100$ [s], krajnje vrijeme simulacije je 2,5 sata te je zadana mreža sa ćelijama (48, 32). Jer se model u vremenu rješava implicitno, metoda je stabilna te nema potrebe za ograničenjem maksimalnog vremenskog koraka.

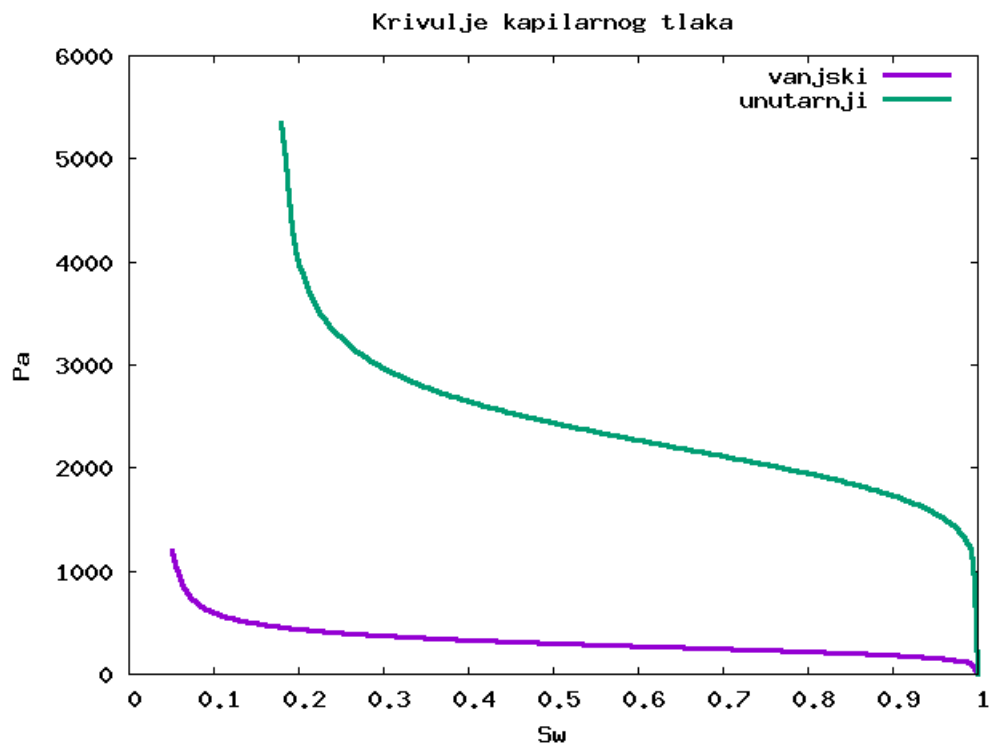


Slika 6.1: Zasićenje nevlažeće faze, $t=9000$ [s], TPFa metoda

Korištenjem metode TPFa, za riješiti sustav nelinearnih jednadžbi pomoću Newtonove metode, potrebno je napraviti 128 iteracija. Izračun je trajao 5.633 [s] na jednome procesoru.

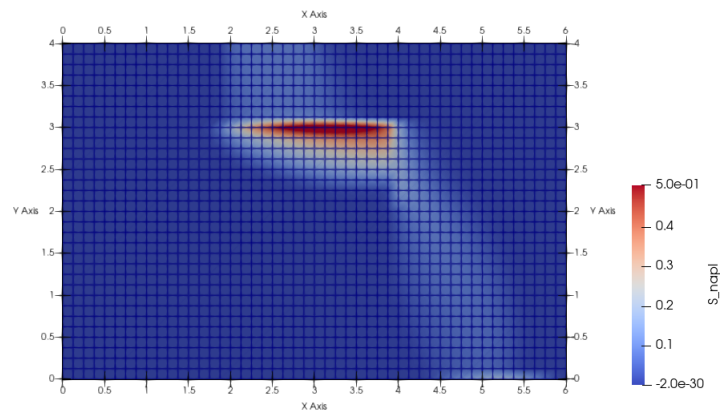
Iz slike 6.1 je vidljiva promjena zasićenja nevlažeće faze. Kako se sustav nalazi u području sile teže, utisnuti nevlažeći fluid se počinje spuštati prema dolje. Kapilarni tlak pri

prijelazu iz vanjskog dijela u unutrašnji blok treba biti neprekidan pa dolazi do diskontinuiteta u zasićenju vlažeće faze. Kako nevlažeća faza dolazi do bloka s manjim kapilarnim tlakom od onog koji se nalazi u bloku, materijal unutar bloka se ponaša nepropusno. Stoga se nevlažeća faza nakuplja na gornjoj granici bloka te dio na kraju zaobilazi i nastavlja se spuštati prema donjoj nepropusnoj granici.



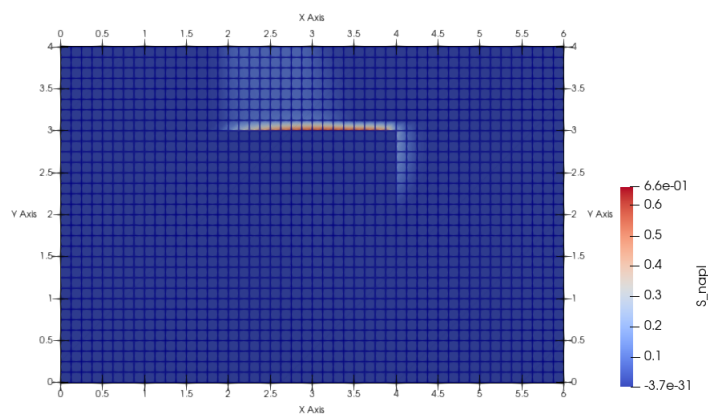
Slika 6.2: Kapilarne krivulje unutar i van bloka

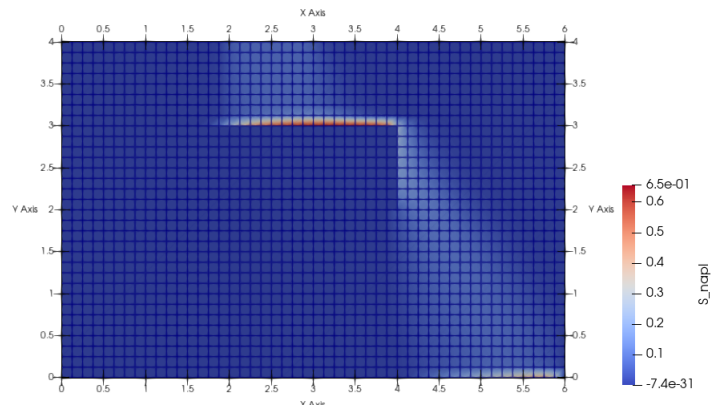
Sa primijenjenom MPFA metodom se dobije isto rješenje, ali situacija je drugačija kod Box metode. Iako je Box metoda izračunala rješenje, ono nije realno. Naime, po slici 6.3 bi se trebalo zaključiti kako drugi materijal ipak nije nepropusan jer nevlažeća faza uspijeva proći kroz njegovu gornju granicu.

Slika 6.3: Zasićenje nevlažeće faze, $t=9000$ [s], Box metoda

Diskontinuitet u zasićenju vlažeće faze predstavlja problem Box metodi jer ona reprezentira zasićenje kao neprekidnu po dijelovima afinu funkciju. Kada numerički prikazujemo model, granica između materijala treba pasti na granicu između elemenata. U Box metodi, nodalne točke padaju na tu granicu, za razliku od TPFA i MPFA metode gdje se nalaze u centrima elemenata. Stoga je potrebno uvesti određene korekcije unutar koda, opisane u [4].

Nakon uvedenih promjena u inicijalnome kodu, iz slika 6.4 i 6.5 je opet vidljiva nepropusnost materijala unutrašnjeg bloka prema vodi.

Slika 6.4: Zasićenje nevlažeće faze, $t=2460$ [s], Box metoda sa korekcijom inicijalnog koda



Slika 6.5: Zasićenje nevlažeće faze, $t=9000$ [s], Box metoda sa korekcijom inicijalnog koda

U tablici 6.1 su prikazani neki od dobivenih rezultata nakon odrađenih simulacija, koje su gore opisane.

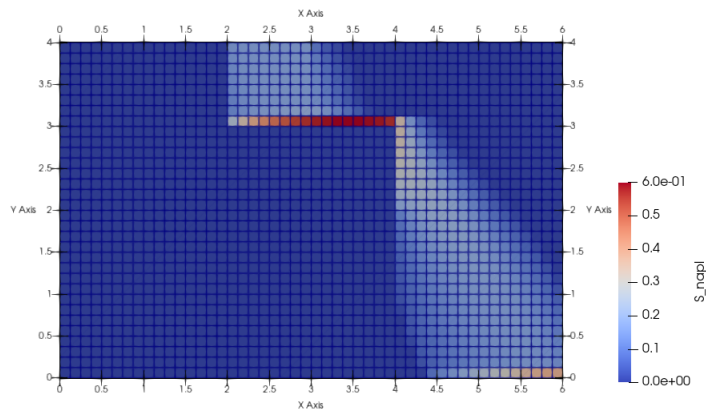
| * | TPFA | MPFA | BOX |
|----------------------------|---------|---------|---------|
| CPU vrijeme izračuna [s] | 5.633 | 22.002 | 13.011 |
| broj iteracija | 128 | 128 | 304 |
| maksimalni vremenski korak | 3679.02 | 3679.02 | 3884.45 |

Tablica 6.1: Usporedba prostornih diskretizacija za rješavanje inkompresibilnog 2p modela koji koristi V-G kapilarne krivulje

Iz tablice 6.1 je sada vidljivo kako MPFA i TPFA metoda koriste isti broj Newtonovih iteracija te imaju jednak maksimalni vremenski korak. Ipak, TPFA metoda se pokazuje višestruko bržom te stoga i učinkovitijom. Box metodi je potreban veći broj iteracija za izračun rješenja, ali se pokazala bržom od MPFA metode.

Također, moguće je zamijeniti van Genuchtenove kapilarne krivulje s Brooks-Coreyevim kapilarnim krivuljama. Za pripadnu konverziju između parametara koriste se jednadžbe opisane u [6]. Sada za unutrašnji blok imamo parametre: $\lambda = 6.309$, $p_e = 1.76e3$ [Pa]; dok su za vanjski blok konvertirani parametri jednaki: $\lambda = 3.697$, $p_e = 1.84e2$ [Pa].

Uz produženo vrijeme trajanja simulacije (5,55 sati), krajnje zasićenje je vidljivo na slici 6.6.

Slika 6.6: Zasićenje nevlažeće faze, $t=2e4$ [s], TPFA metoda

Kao i prije, u tablici 6.2 prikazani su neki od rezultata opisane simulacije. TPFA i MPFA metode opet dijele broj Newtonovih iteracija te maksimalni vremenski korak, ali se ovaj put korištenje Box metode pokazalo najbržim.

| * | TPFA | MPFA | BOX |
|----------------------------|---------|---------|---------|
| CPU vrijeme izračuna [s] | 7.288 | 16.592 | 6.830 |
| broj iteracija | 167 | 167 | 173 |
| maksimalni vremenski korak | 2325.33 | 2325.33 | 2744.25 |

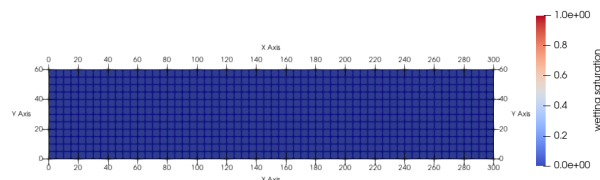
Tablica 6.2: Usporedba prostornih diskretizacija za rješavanje inkompresibilnog 2p modela koji koristi B-C kapilarne krivulje

6.2 Primjer 2

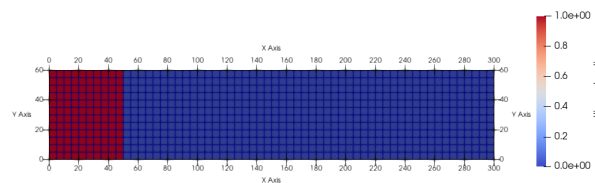
U ovome primjeru se promatra eksplicitni transportni model zadan linearnom zadaćom. Vlažeću i nevlažeću fazu predstavljaju dva nemješiva fluida sa istim svojstvima. Inicijalno je domena zasićena nevlažećom fazom. Kroz lijevu granicu se utiskuje vlažeći fluid brzinom $v = 1e-5$ [m/s] te se gibanje ulaznog fronta nastavlja odvijati stalnom brzinom. Kako je tok stacionaran, a vrijedi da su tlak i brzina obrnuto proporcionalni, slijedi da je i tlak konstantan ($p = 1e5$ [Pa]). Fluidi su gustoće 1000 [kg/m³] te viskoznosti $\mu = 1e-3$ [Pa*s]. Unutar cijele domene je kapilarni tlak jednak nuli, kao i rezidualna zasićenja obje faze.

Za domenu je uzet pravokutnik dimenzija 300m x 60m, tj. $\Omega = (0,300) \times (0,60)$. Gornja i donja granica domene su nepropusne te je tu zadan homogen Neumannov rubni uvjet, dok je na lijevoj granici zadan Dirichletov rubni uvjet ($s^w = 1$). Na desnoj granici je slobodno istjecanje (eng. *outflow*) te fluid kroz nju okomito prolazi konstantnom brzinom i tlakom, stoga nije potrebno zadavati rubne uvjete. Uz dodatne parametre: $\varepsilon = 0.2$, $k^s = 1e-7$ [m²] te $T = 283.15$ [K] (10°C), jednadžba zasićenja (5.20) se sada rješava eksplicitno.

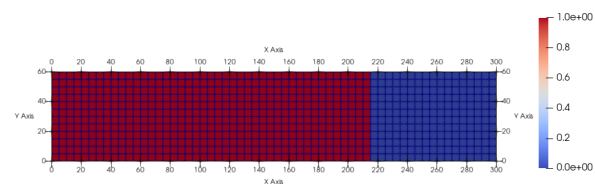
Početno rješenje za eksplicitnu metodu je: $s^w = 0$, a vremenski korak je konstantan kroz cijelu simulaciju (1e5 [s]). Krajnje vrijeme trajanja simulacije je 69.44 dana, a zadana mreža ima 200 ćelija na horizontalnoj liniji te 12 ćelija na vertikalnoj. Za rješenje problema s jednim procesorom je bilo potrebno 120 iteracija te vrijeme od 3.928 [s].



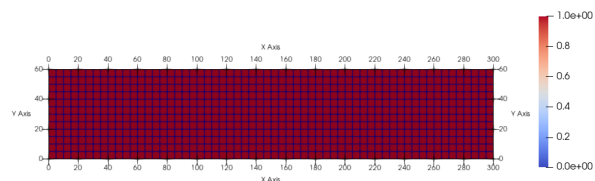
Slika 6.7: Zasićenje vlažeće faze, t=0 [s]



Slika 6.8: Zasićenje vlažeće faze, t=1e6 [s]



Slika 6.9: Zasićenje vlažeće faze, t=4.3e6 [s]



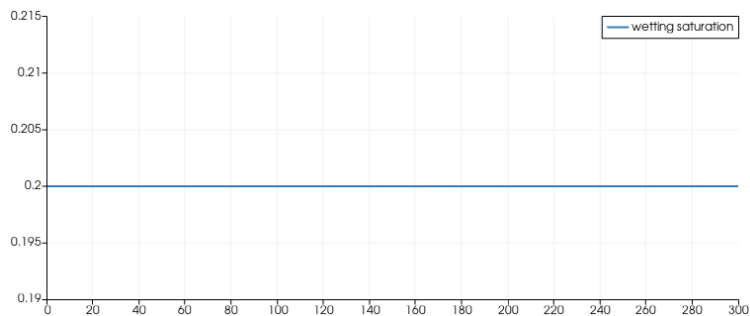
Slika 6.10: Zasićenje vlažeće faze, t=6e6 [s]

6.3 Primjer 3

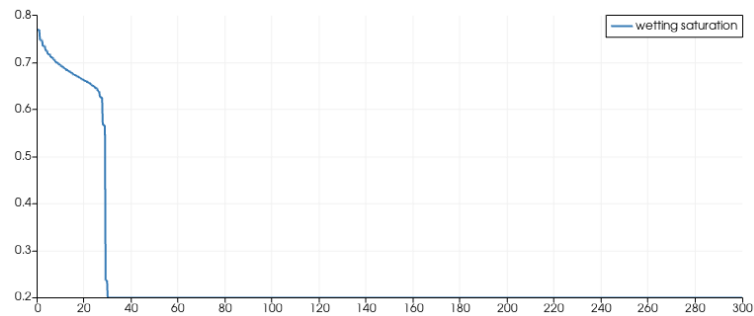
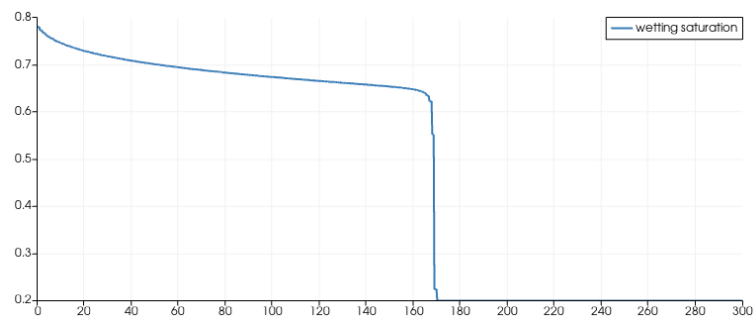
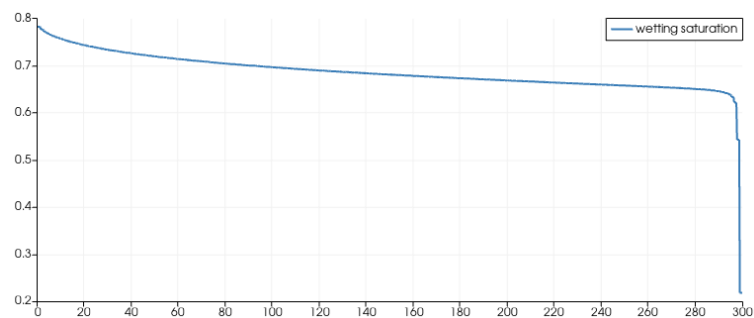
Ovaj primjer proučava utiskivanje nestlačive vode s lijeve granice domene u domenu zasićenu nevlažećom tekućinom. Nevlažeća tekućina ima ista svojstva kao i nestlačiva voda koja predstavlja vlažeću fazu, a faze su nemješive. Tok nije stacionaran te stoga ni kapilarni tlak nije zanemaren. Sada je uz jednadžbu zasićenja potrebno riješiti i jednadžbu tlaka, a za to se koristi IMPES algoritam. Nepoznanice koje tražimo su: s^w te p_n , a za početne vrijednosti su odabrane: $s^w = 0.2$, $p_n = 0$. Zadana rezidualna zasićenja su: $s^{wr} = 0.2$, $s^{nr} = 0.2$.

Domenu predstavlja pravokutnik dimenzija 300m x 60m, tj. $\Omega = (0,300) \times (0,60)$. Jer su gornja i donja granica nepropusne, za obe jednadžbe je zadan homogen Neumannov rubni uvjet na njima, dok je Dirichletov rubni uvjet ($p_n = 2e5$, $s^w = 0.8$) zadan na ulaznoj, lijevoj granici. Na desnoj granici je slobodno istjecanje, a za jednadžbu tlaka je zadan Neumannov rubni uvjet (flux = $3e-4$ [kg/(m²*s)]).

Za kapilarnu krivulju se koristi Brooks-Coreyev model, a dani parametri su: $p_e = 0$ [Pa], $\lambda = 2$. Uz dodatne parametre za poroznost ($\varepsilon = 0.2$), intrinzičnu propusnost ($k^s = 1e-7$) te CFL uvjet (postavljen na 0.95), model se rješava pomoću IMPES algoritma. Početni vremenski korak $Dt_{Initial} = 100$ [s], a krajnje vrijeme trajanje simulacije je $9.67e7$ [s] (1111.111 dana). Za mrežu s 270 ćelija na horizontalnoj stranici te 54 ćelije na vertikalnoj, algoritmu je potrebno 1246 iteracija za riješiti problem. Vrijeme rješavanja je iznosilo: 479.932 [s].



Slika 6.11: Zasićenje vlažeće faze, t=0 [s]

Slika 6.12: Zasićenje vlažeće faze, $t=9.28e6$ [s]Slika 6.13: Zasićenje vlažeće faze, $t=5.48e7$ [s]Slika 6.14: Zasićenje vlažeće faze, $t=9.67e7$ [s]

Iz slika je vidljivo kako se rješenje zasićenja sastoji od vala razrjeđenja (ili "lepeze") te šoka. Rankine-Hugoniotovim uvjetom se opisuje odnos između stanja s obje strane šoka te se s njim određuju njegova visina i brzina. Sama brzina prostiranja vala je konstantna te predstavlja brzinu šoka.

Ovakvo ponašanje je predviđeno Buckley-Leverettovom teorijom, uz korigiranu prisutnost malog kapilarnog tlaka.

Bibliografija

- [1] Zhangxin Chen, *Reservoir simulation: mathematical techniques in oil recovery*, SIAM, 2007.
- [2] DuMu^x handbook, <https://dumux.org/docs/>.
- [3] Mladen Jurak, *Dvofazni nemješivi tok*, <https://web.math.pmf.unizg.hr/nastava/mmtkps/>.
- [4] ———, *Dvofazni tok*, <https://web.math.pmf.unizg.hr/nastava/mmtkps/>.
- [5] ———, *Tok i transport višekomponentnih fluida*.
- [6] Hubert J Morel-Seytoux, Philip D Meyer, Mahmood Nachabe, Jaoudat Tourna, M Th Van Genuchten i Robert J Lenhard, *Parameter equivalence for the Brooks-Corey and van Genuchten soil characteristics: Preserving the effective capillary drive*, *Water Resources Research* **32** (1996), br. 5, 1251–1258.
- [7] George F Pinder i William G Gray, *Essentials of multiphase flow and transport in porous media*, John Wiley & Sons, 2008.

Sažetak

U diplomskome radu je uveden model dvofaznog toka kroz poroznu sredinu te je opisana metoda konačnih volumena za njegovo rješavanje. U prvom poglavlju je opisana porozna sredina te su uvedena osnovna svojstva toka fluida koji njome prolazi. U drugom poglavlju je uvedena jednačba sačuvanja mase na makroskali pomoću koje možemo predvidjeti transport mase unutar sustava. U trećem poglavlju je opisan Darcyjev zakon te makroskopska svojstva fluida i porozne sredine. Uparivanjem jednačbe sačuvanja mase te Darcyjevog zakona, četvrto poglavlje uvodi dvofazni tok nemješivog fluida. Također, u istome poglavlju je izvedena 1D Buckley-Leverettova jednačba. Peto poglavlje se bavi opisom mogućih numeričkih načina rješavanja uvedenog modela. Preciznije, za metodu konačnih volumena opisane su neke od njezinih verzija (TPFA, MPFA te Box metoda). Nakon odabira jedne od njih, korištenjem IMPES algoritma model je moguće efikasno riješiti. Šesto poglavlje pruža rezultate te opis tri numeričke simulacije od različitih dvofaznih nemješivih modela. Simulacije su napravljene u programskoj biblioteci DuMu^x.

Summary

In this thesis, a model of two-phase flow through a porous medium is introduced and the finite volume method for its solution is described. The first chapter describes the porous medium and introduces the basic properties of the fluid flow that passes through it. In the second chapter, the mass conservation equation on the macroscale is introduced, by which we can predict the transport of mass within the system. The third chapter describes Darcy's law and some additional macroscopic properties of fluids and porous media. Using the mass conservation equation and Darcy's law, the fourth chapter introduces a two-phase flow of an immiscible fluid. Also, the 1D Buckley-Leverett equation is derived in the same chapter. The fifth chapter deals with the description of possible numerical ways for solving the introduced model. More precisely, for the finite volume method some of its versions (TPFA, MPFA and Box method) are described. After selecting one of them, using the IMPES algorithm the model can be solved efficiently. The sixth chapter provides the results and a description of three numerical simulations from different two-phase immiscible models. Simulations were made in the program library DuMu^x.

Životopis

Rođena sam 22.02.1997. godine u Splitu. Svoje školovanje sam započela u OŠ "Brda" te ga nastavila u 3.gimnaziji Split, popularno zvanj MIOC. Tijekom osnovne i srednje škole sam se natjecateljski te rekreativno bavila plivanjem. 2015. godine upisujem preddiplomski sveučilišni studij Matematika na Matematičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu. Titulu sveučilišne prvostupnice matematike stječem 2019. godine kada upisujem Diplomski sveučilišni studij Primijenjena matematika na istome fakultetu. Za vrijeme studiranja sam sudjelovala u manifestaciji Dan i noć PMF-a te bila član studentske udruge eStudent kao dio tima za Društveno odgovorno poslovanje.