

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Manuela Koštroman

**DVOFAZNI TOK FLUIDA KROZ HETEROGENU
POROZNU SREDINU. UVJETI NA GRANICI
RAZLIČITIH TIPOVA STIJENA**

Diplomski rad

Voditelj rada:
Prof. dr .sc. Mladen Jurak

Zagreb, travanj 2015

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. _____

Sadržaj

Sadržaj	iii
Uvod	2
1 Fluidi u poroznoj sredini	3
1.1 Porozna sredina i fluidi	3
1.2 Jednofazni tok kroz poroznu sredinu	4
2 Dvofazni tok kroz heterogenu poroznu sredinu	7
2.1 Svojstva dvofaznog toka	7
2.2 Generalizirani Darcyjev zakon	10
2.3 Krivulje kapilarnog tlaka	11
2.4 Krivulje relativnih propusnosti	13
2.5 Matematički model dvofaznog toka	15
2.6 Formulacija	18
3 Numerički model dvofaznog toka	21
3.1 Upwind metoda	21
3.2 Prostorna i vremenska diskretizacija	25
3.3 Jednodimenzionalni slučaj	26
3.4 Metoda konačnih volumena	29
4 Test primjeri	40
4.1 Prvi primjer	41
4.2 Drugi primjer	46
4.3 Treći primjer	50
Bibliografija	55

Uvod

Podzemne vode su dragocjen resurs važan za sve oblike života na zemlji. Njihova kvaliteta je ugrožena curenjem otpadnih voda s odlagališta ili pak slučajnim izljevima nafte i otpadnih supstanci iz industrijskih pogona. Pri rješavanju problema onečišćenja podzemnih voda, numeričke simulacije mogu pomoći boljem razumjevanju samog procesa i na taj način pridonijeti optimizaciji saniranja problema. Naime, ponašanje vode i otpadnih voda ili vode i nafte u poroznoj sredini, je dobro aproksimirano matematičkim modelom dvofaznog toka kroz poroznu sredinu.

Osim za sanaciju onečišćenja podzemnih voda, matematički model dvofaznog toka kroz poroznu sredinu je važan u eksploataciji nafte i plina iz naftnih i plinskih ležišta te pri zakopavanju nuklearnog otpada u duboke geološke slojeve.

U ovom radu se bavimo modeliranjem dvofaznog toka kroz heterogenu poroznu sredinu.

U Poglavlju 1 uvodimo parametre koji dobro karakteriziraju poroznu sredinu i fluide te predstavljamo matematički model za jednofazni tok kroz poroznu sredinu.

Izvod matematičkog modela za dvofazni tok kroz heterogenu poroznu sredinu te osnovne pojmove modela uvodimo u Poglavlju 2. Dobiveni matematički model se sastoji od dvije nelinearne i nestacionarne parcijalne diferencijalne jednačbe s pripadajućim inicijalnim i rubnim uvjetima.

Diskretizaciju parcijalnih diferencijalnih jednačbi dvofaznog toka izvodimo u Poglavlju 3. Koristimo metodu konačnih volumena s upwind shemom. Upwind shemu koristimo za diskretizaciju korektivnog člana čime osiguravamo stabilizaciju numeričke metode. Za vremensku diskretizaciju koristimo implicintu metodu.

Implementacija testnih primjera je napisana pomoću software-a DUNE. U Poglavlju 4 su prikazani dobiveni rezultati.

Poglavlje 1

Fluidi u poroznoj sredini

1.1 Porozna sredina i fluidi

Porozna sredina je materijal koji se sastoji od dva dijela: čvrstog i pornog dijela (šupljina). Porni dio porozne sredine je ispunjen s jednim ili više fluida (npr. zrakom ili vodom). Najtipičniji primjer porozne sredine je pijesak. Čvrsti dio se sastoji od zrnaca pijeska, a praznine među zrnima čine porni dio.

Faza je kemijski homogeni dio sustava koji je odvojen od drugih dijelova sustava jasno definiranom fizičkom granicom. Kažemo se da je sustav *jednofazan* ako su šupljine u poroznoj sredini ispunjene jednim fluidom (npr. naftom) ili s više fluida koji se mogu u potpunosti izmješati (npr. čista voda i otopina soli). Sustav je *višefazan* ako su šupljine ispunjene s više fluida koji se ne mogu međusobno potpuno izmiješati tj. među njima ostaje jasna granica (npr. voda i nafta). Čvrsti dio porozne sredine se definira kao čvrsta faza.

Bitnu stavku u modeliranju toka kroz poroznu sredinu čini odabir prostorne skale. Razlikujemo mikroskopsku i makroskopsku skalu. *Mikroskopska skala* je prostorna skala reda veličine 10^{-3} m. S gledišta ove skale, fluidi i čvrsta faza porozne sredine su neprekidne i susjedne supstance između kojih postoji jasno definirana granica. Također, na *elementarne veličine* kao što su masena gustoća ili brzina gledamo kao na neprekidne funkcije vremena i prostora. Matematički model toka fluida kroz porni dio porozne sredine na mikroskopskoj skali je opisan Navier-Stokesovim sustavom jednačini uz koje se postavljaju odgovarajući rubni uvjeti. Međutim, geometriju pornog prostora ne možemo dovoljno precizno opisati da bi postavljanje rubnih uvjeta bilo moguće. Zato je uvedena makroskopska skala.

Makroskopska skala je prostorna skala reda veličine od 10 do 100m. Na makroskopskoj skali nema jasne granice između fluida i čvrste faze porozne sredine, već sve faze zauzimaju dio promatranog dijela prostora. Svakoj točki iz kontinuuma na makroskopskoj skali je pridružena srednjena vrijednost elementarnih veličina s mikroskopske skale. Područje

na kojem se usrednjenjavaju vrijednosti zove se *reprezentativni elementarni volumen*, REV. Na taj se način dobivaju makroskopske jednadžbe za koje nije potreban egzaktan opis geometrije porozne sredine već samo mjerljiva statistička svojstva porozne sredine i fluida. Stoga ćemo se u daljnjem radu baviti proučavanjem matematičkog modela toka fluida kroz poroznu sredinu na makroskopskoj skali.

Osim prostorne skale, uvedimo još dva pojma koja su bitna za opis porozne sredine: poroznost i propusnost. *Poroznost* Φ je veličina koja pokazuje koliki dio porozne sredine zauzima porni prostor. Računamo ju prema

$$\Phi(\mathbf{x}) = 1 - \frac{V^s(\mathbf{x})}{V(\mathbf{x})}, \quad (1.1)$$

gdje je $V(\mathbf{x})$ ukupni volumen koji zauzima porozna sredina, a $V^s(\mathbf{x})$ volumen čvrstog dijela porozne sredine. *Propusnost* je veličina koja pokazuje koliki otpor toku fluida daje porozna sredina. Simetrični tenzor *apsolutne propusnosti* \mathbb{K} je parametar porozne sredine. \mathbb{K} je funkcija položaja u slučaju heterogene porozne sredine. Nadalje ćemo pretpostavljati da je porozna sredina *izotropna* odnosno da je tok fluida jednak u svim smjerovima. Stoga će tenzor apsolutne propusnosti \mathbb{K} biti najviše dijagonalna matrica, tj.

$$\mathbb{K}(\mathbf{x}) = k(\mathbf{x}) \mathbf{I}, \quad (1.2)$$

gdje je $k(\mathbf{x})$ skalarna funkcija.

Navedimo još svojstva fluida. Među važna svojstva ubrajamo maseni udio ω_i , masenu gustoću ρ , dinamičku viskoznost μ , tlak p te temperaturu T . Pretpostavimo li da se fluid sastoji od N kemijskih komponenti, *maseni udio* komponente i označavamo s ω_i . Vrijedi $0 \leq \omega_i \leq 1$. U ovom radu ćemo razmatrati samo one fluide koji se sastoje od jedne komponente ω . *Masena gustoća* ρ je općenito funkcija kompozicije fluida, tlaka i temperature. *Dinamička viskoznost* μ je mjera koja pokazuje koliko je fluid otporan na deformacije smicanja, te je također funkcija kompozicije fluida, tlaka i temperature.

Nadalje ćemo pretpostavljati da su fluidi kojima se bavimo u ovom radu *izotermni*, odnosno neovisni o temperaturi, te da su *inkompresibilni* odnosno neovisni o tlaku. Uz takve pretpostavke, masena gustoća ρ i dinamička viskoznost μ su konstante.

1.2 Jednofazni tok kroz poroznu sredinu

Opišimo makroskopske jednadžbe za tok fluida kroz poroznu sredinu u slučaju kada je porni prostor ispunjen samo jednim fluidom, npr. vodom ili naftom.

Darcyjev zakon

Darcyjev zakon je eksperimentalno dokazana tvrdnja (Henry Darcy, 1856) za slučaj jednofaznog toka kroz poroznu sredinu. Kako bismo precizno iskazali ovaj zakon, definiramo

dvije brzine fluida u poroznoj sredini.

Prva brzina je *Darcyjeva brzina* ili *prividna makroskopska brzina*, u oznaci \mathbf{u} , koja se definira kao omjer protoka fluida Q i površine A kroz koju fluid protjeće (Q se definira kao promjena volumena fluida po jedinici vremena). Druga brzina je *stvarna makroskopska brzina* koja se dobije dijeljenjem Darcyjeve brzine \mathbf{u} s poroznošću Φ pošto se tok fluida odvija samo u pornom prostoru.

Darcyjev zakon nam daje vezu između Darcyjeve brzine i gradijenta tlaka:

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbb{K}}{\mu}(\nabla p - \rho\mathbf{g}), \quad (1.3)$$

gdje je

- $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ - Darcyjeva brzina dimenzije $[m/s]$,
- $p(\mathbf{x}, t)$ - tlak fluida; nepoznata funkcija dimenzije $[Pa] = [N/m^2]$,
- $\mathbb{K}(\mathbf{x})$ - simetrični tenzor apsolutne propusnosti dimenzije $[m^2]$,
- \mathbf{g} - gravitacijski vektor dimenzije $[m/s^2]$,
- μ - dinamička viskoznost fluida (konstanta) dimenzije $[Pa\ s]$.

Darcyjev zakon čini dobru aproksimaciju zakona o očuvanju količine gibanja.

Zakon sačuvanja mase

Neka je $\Omega \subseteq R^d$, $d = 2, 3$ domena. Zakon očuvanja mase na makroskopskoj skali je izražen sljedećom diferencijalnom jednačbom

$$\frac{\partial(\Phi\rho)}{\partial t} + \text{div}(\rho\mathbf{u}) = \rho q \quad \text{u } \Omega \quad (1.4)$$

gdje je

- $\Phi(\mathbf{x})$ - poroznost, bezdimenzionalna veličina,
- ρ - gustoća fluida (konstanta) dimenzije $[kg/m^3]$,
- $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ - Darcyjeva brzina dimenzije $[m/s]$,
- $q(\mathbf{x}, t)$ - izraz za izvor/ponor dan u $[s^{-1}]$.

Integralni oblik ove jednačbe kaže da je brzina promjene mase fluida po proizvoljnom volumenu $\Omega_0 \subseteq \Omega$ jednaka protoku fluida preko granice $\partial\Omega_0$ i doprinosu izvora odnosno ponora u Ω_0 .

Inicijalni i rubni uvjeti

Da bi u potpunosti opisali matematički model za jednofazni tok, potrebno je zadati početne i rubne uvjete.

Neka je $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ ograničena domena sa vanjskim rubom $\Gamma = \partial\Omega$. Postoje tri tipa rubnih uvjeta.

- Kada je tlak poznata funkcija po rubu Γ , tada je rubni uvjet dan sa

$$p = g_1 \text{ na } \Gamma. \quad (1.5)$$

Ovaj tip rubnog uvjeta u teoriji parcijalnih diferencijalnih jednadžbi se zove *rubni uvjet prvog tipa* ili *Dirichletov rubni uvjet*.

- Kada je protok mase poznat na rubu Γ onda je rubni uvjet dan sa

$$\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = g_2 \text{ na } \Gamma, \quad (1.6)$$

gdje \mathbf{n} označava vanjsku jediničnu normalu na Γ . Ovaj tip rubnog uvjeta zovemo *rubni uvjet drugog tipa* ili *Neumannov rubni uvjet*.

- *Rubni uvjet trećeg tipa* ili *mješoviti rubni uvjet* je dan s

$$g_p p + g_u \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = g_3 \text{ na } \Gamma, \quad (1.7)$$

gdje su g_p , g_u i g_3 poznate funkcije.

Početni ili *inicijalni* uvjet zadajemo u trenutku $t_0 = 0$ za funkciju tlaka p

$$p(\mathbf{x}, 0) = p_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (1.8)$$

U ostatku rada ćemo se baviti dvofaznim tokom u kojem se Darcyjev zakon i zakon sačuvanja mase modificiraju kako bi uzeli u obzir prisutnost dva različita fluida u pornom prostoru.

Poglavlje 2

Dvofazni tok kroz heterogenu poroznu sredinu

Model dvofaznog toka kroz poroznu sredinu ćemo bazirati na modelu jednofaznog toka. Postoje dvije bitne razlike između ta dva modela. Prvo, kod jednofaznog toka jedan fluid ispunjava cijeli porni prostor, dok kod dvofaznog toka dva fluida ispunjavaju porni prostor. Volumni dio fluida ostaje konstantan, ali se omjer jednog i drugog fluida mijenja. Može se dogoditi da jedan fluid ispunjava gotovo cijeli porni prostor, a drugi fluid preostali mali dio. Da bi znali volumni udio pojedinog fluida, uvodimo pojam zasićenja. Druga bitna razlika je to što kod dvofaznog toka fluidi međusobno djeluju jedan na drugog, tj. javljaju se određene sile na granici između fluida. Stoga uvodimo pojmove kao što su kapilarni tlak i relativna propusnost.

2.1 Svojstva dvofaznog toka

Kapilarni tlak

Na molekularnoj razini, javljaju se sile adhezije i kohezije. Adhezija privlači molekule fluida ka čvrstoj stijenci dok kohezija privlači molekule fluida jedne drugima. Na granici dodira dvaju fluida te sile nisu u ravnoteži pa na mikroskopskoj razini vidimo zakrivljenu granicu među fluidima. Nastalu granicu zovemo *ploha separacije*. U točki dodira čvrste stijenske i plohe separacije definiramo *kut vlaženja* θ . Fluid za koji je $\theta < 90^\circ$ nazivamo *vlažeća faza*, te označavamo s w (prema eng. wetting phase), a onaj za koji je $\theta > 90^\circ$ nazivamo *nevlažeća faza* i označavamo s n (eng. non-wetting phase). U sustavima voda-plin ili voda-nafta, voda je vlažeća faza, dok je u sustavu nafta-plin, najčešće nafta vlažeća faza.

Uočimo da je tlak nevlažeće faze veći od tlaka vlažeće faze. Prekid funkcije tlaka koji nastaje pri prijelazu separacijske plohe između nevlažeće i vlažeće faze je modeliran *Laplace-Youngovim zakonom*

$$p_n - p_w = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.1)$$

gdje su

- p_n i p_w mikroskopski tlakovi s nevlažeće i vlažeće strane granice plohe,
- σ - površinska napetost,
- R_1 i R_2 - radijusi zakrivljenosti separacijske plohe.

Na makroskopskoj razini nemamo plohu separacije, ali idalje postoji prekid tlaka. Skok koji nastaje kao razlika makroskopskih tlakova nevlažeće i vlažeće faze zovemo *kapilarni tlak* i označavamo s p_c :

$$p_c = p_n - p_w. \quad (2.2)$$

Uvedimo još pojam ulaznog tlaka. *Ulazni tlak* p_d je najmanji kapilarni tlak koji se mora dosegnuti da bi nevlažeća faza dospjela u najveće pore porozne sredine.

Zasićenja

Neka su V^w i V^n redom volumeni vlažeće i nevlažeće faze. Tada je

$$V^v = V^w + V^n. \quad (2.3)$$

Dio pornog prostora porozne sredine koji zauzima faza α zovemo *zasićenje faze* α i označavamo sa S_α :

$$S_\alpha = \frac{V^\alpha}{V^v}. \quad (2.4)$$

Iz definicije slijedi

$$S_w + S_n = 1, \quad 0 \leq S_w, S_n \leq 1. \quad (2.5)$$

Pustimo li da voda (vlažeća faza) isteće iz porozne sredine, mali dio vode će preostati u izoliranim kapima priljubljenima uz čvrstu stijenu. Isto tako, natopimo li poroznu sredinu vodom, nećemo moći istisnuti sav zrak (nevlažeću fazu) iz porozne sredine. Te preostale dijelove vlažeće odnosno nevlažeće faze nazivamo *rezidualna zasićenja* vlažeće i nevlažeće faze te označavamo sa S_{wr} i S_{nr} respektivno.

Pretpostavimo sada da je porozna sredina u potpunosti zasićena vlažećom fazom. Kada počnemo dovoditi nevlažeću fazu, ona će prvo ući u najveće pore porozne sredine, a

vlažeća faza će se povlačiti u manje pore sve manjeg radijusa. Prema (2.1) mikroskopski kapilarni tlak na granici dva fluida se povećava sa smanjenjem radijusa šupljina. Iz toga možemo zaključiti da se makroskopski kapilarni tlak povećava sa smanjenjem zasićenja vlažeće faze, odnosno zaključujemo da postoji zavisnost između kapilarnog tlaka i zasićenja vlažeće faze. U općenitom slučaju kapilarni tlak ovisi o više komponenti, ali ovdje ćemo razmatrati kapilarni tlak kao funkciju zasićenja vlažeće faze S_w :

$$p_c(S_w) = p_n - p_w. \quad (2.6)$$

Ustvrdili smo da se odvođenjem vlažeće faze iz porozne sredine kapilarni tlak povećava. Kako se zasićenje S_w približava rezidualnom zasićenju S_{wr} , kapilarni tlak jako raste i time onemogućava veća smanjenja zasićenja vlažeće faze S_w . Slijedi da je kapilarni tlak, u ovisnosti o zasićenju vlažeće faze, monotono padajuća funkcija s vertikalnom asimptotom u rezidualnom zasićenju S_{wr} .

Definiramo još *efektivno zasićenje vlažeće faze* S_e

$$S_e = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{nr}}. \quad (2.7)$$

Uočimo da je $0 \leq S_e \leq 1$.

Makroskopska heterogenost

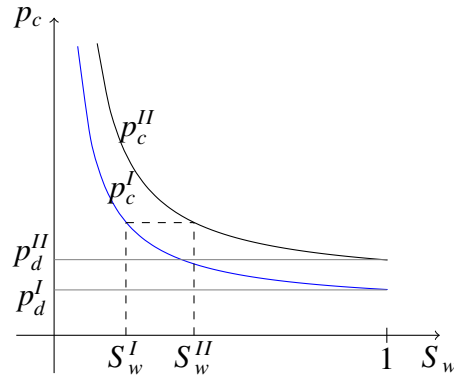
Razmotrimo sada poroznu sredinu koja se sastoji od dva materijala: grubog pijeska na jednom dijelu domene i finog pijeska na drugom dijelu. S makroskopske skale, to je modelirano prekidom porozne sredine gdje Γ predstavlja granica između dvije poddomene.

Označimo sa Ω^I dio domene ispunjen grubim pijeskom te sa Ω^{II} dio domene ispunjen finim pijeskom. Tada će tenzor apsolutne propusnosti $\mathbb{K}(\mathbf{x}) = k(\mathbf{x}) \mathbf{I}$ (za izotropnu poroznu sredinu) imati skok na granici Γ

$$k(\mathbf{x}) = \begin{cases} k^I & \mathbf{x} \in \Omega^I, \\ k^{II} & \mathbf{x} \in \Omega^{II}. \end{cases} \quad (2.8)$$

Slično, i poroznost može varirati u različitim poddomenama. Također, kao posljedica promjene dijametra pora različitih materijala, postojati će različita veza između kapilarnog tlaka i zasićenja u različitim poddomenama. Na slici 2.1 vidimo primjer krivulja kapilarnog tlaka.

Pretpostavimo li da je porozna sredina na početku potpuno zasićena vlažećom fazom (npr. vodom), tada će nevlažeći fluid (npr. nafta) koji teče kroz pore grubog pijeska, prijeći u pore finog pijeska samo ako je kapilarni tlak dovoljno velik. Minimalni kapilarni tlak



Slika 2.1: Porozna sredina s diskontinuitetom

koji se treba dosegnuti je ulazni tlak p_d . Na slici 2.1 je $p_d^{II} > p_d^I$ što znači da nafta neće odmah ući u pore finog pijeska već će se preliti preko njegovog ruba.

Razmotrimo sada situaciju u kojoj su oba fluida prisutna u obje poddomene. Neka je S_w^I zasićenje vlažeće faze u točki granice Γ kada fluid dolazi iz Ω^I i S_w^{II} zasićenje vlažeće faze u točki granice Γ kada fluid dolazi iz Ω^{II} . Iz neprekidnosti kapilarnog tlaka $p_c^I(S_w^I) = p_c^{II}(S_w^{II})$ slijedi prekidnost zasićenja vlažeće faze na granici Γ .

2.2 Generalizirani Darcyjev zakon

Eksperimentalno je dokazano da Darcyjev zakon vrijedi i za dvofazne tokove, uz pretpostavku da je izmjena količine gibanja između vlažeće i nevlažeće faze zanemariva.

Darcyjevu brzinu svake od faza $\alpha = w, n$, možemo izraziti pomoću gradijenta tlaka pripadajuće faze

$$\mathbf{u}_\alpha = -\frac{\mathbf{K}_\alpha}{\mu_\alpha}(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}), \quad (2.9)$$

gdje su

- $\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x}, t)$ - Darcyjeva brzina faze α ,
- \mathbf{K}_α - propusnost faze α ,
- μ_α - viskoznost faze α ,
- $p_\alpha(\mathbf{x}, t)$ - tlak faze α ,
- ρ_α - gustoća faze α ,
- \mathbf{g} - gravitacijski vektor.

Za razliku od jednofaznog toka, sada na propusnost \mathbf{K}_α svake od faza $\alpha = w, n$, osim propusnosti čvrste stijenske, utječe i prisutnost druge faze u poroznoj sredini. Navodimo relaciju za propusnost \mathbf{K}_α podržanu eksperimentalnim podacima:

$$\mathbf{K}_\alpha = k_{r\alpha}(S_\alpha) \mathbb{K}, \quad (2.10)$$

gdje su

- $k_{r\alpha}$ - relativna propusnost faze α ,
- \mathbb{K} - apsolutna propusnost.

Relativna propusnost $k_{r\alpha}$ je funkcija zasićenja S_α koja modelira činjenicu da je tok fluida α blokiran prisutnošću drugih fluida. $k_{r\alpha}$ možemo shvaćati kao faktor skaliranja za kojeg vrijedi $0 \leq k_{r\alpha} \leq 1$. Kasnije ćemo navesti primjere krivulja za funkcije relativnih propusnosti.

Uvrstimo li relaciju (2.10) u (2.9) dobivamo *Darcy-Muskatov zakon*

$$\mathbf{u}_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}(S_\alpha)}{\mu_\alpha} \mathbb{K} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}). \quad (2.11)$$

Vrijednost $\lambda_\alpha(S_\alpha) = \frac{k_{r\alpha}(S_\alpha)}{\mu_\alpha}$ zovemo *mobilnost faze α* .

Uočimo da je mobilnost faze α to veća što je veća relativna propusnost $k_{r\alpha}$, a manja viskoznost μ_α .

2.3 Krivulje kapilarnog tlaka

Postoje dva opća načina određivanja krivulje kapilarnog tlaka. Prvi određuje kapilarnu krivulju laboratorijskim mjerenjima. Budući su mjerenja skupa, češće se koristi drugi način, a to je na temelju teorije. Ovdje navodimo dva modela u kojima se funkcionalna veza između kapilarnog tlaka i zasićenja izvodi iz teorijskih razmatranja. Oba modela su izvedena za dvofazne sustave. Njihovi parametri su prilagođeni tako da odgovaraju eksperimentalnim podacima.

Prvi model je **Brooks-Corey model**. *Brooks-Coreyeva funkcija kapilarnog tlaka* zadana je u ovisnosti o efektivnom zasićenju vlažeće faze S_e definiranom s (2.7) na sljedeći način:

$$p_c(S_w) = p_d S_e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (2.12)$$

gdje su

- p_d - ulazni tlak porozne sredine,

- λ - parametar.

Parametar λ je povezan sa distribucijom pora. Najčešće vrijednosti parametra λ su u rangu od 0.2 do 3. λ poprima manje vrijednosti u slučaju kada porozna sredina ima homogenu čvrstu stijenu, te poprima veće vrijednosti kod porozne sredine čija je čvrsta stijena nehomogena.

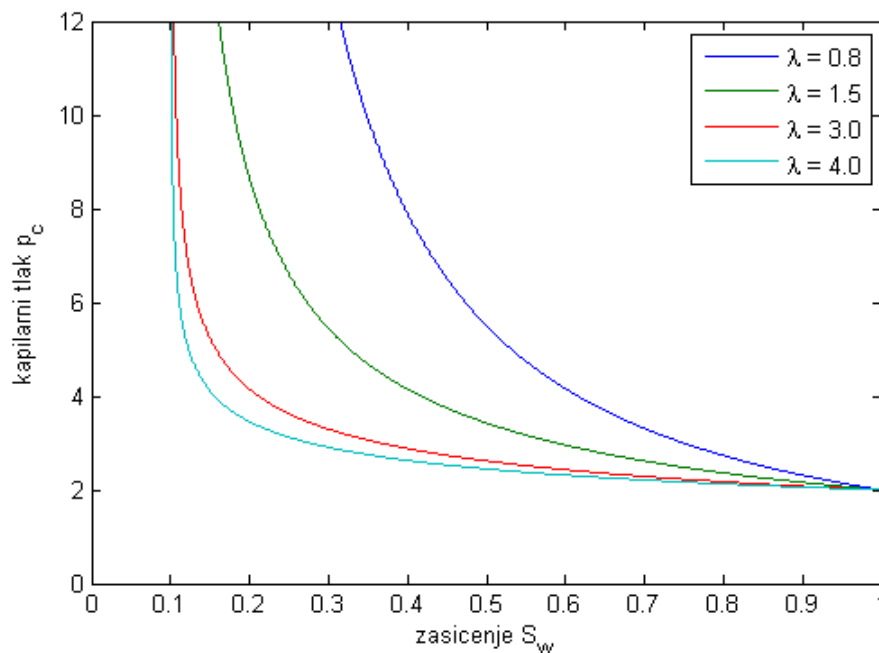
Drugi model za funkcije kapilarnog tlaka je **Van Genuchtenov model** koji dobro modelira dvofazne sustave voda-plin. *Van Genuchtenovova funkcija kapilarnog tlaka* je dana s:

$$p_c(S_w) = \frac{1}{\alpha} (S_e^{\frac{1}{m}} - 1)^{\frac{1}{n}} \quad (2.13)$$

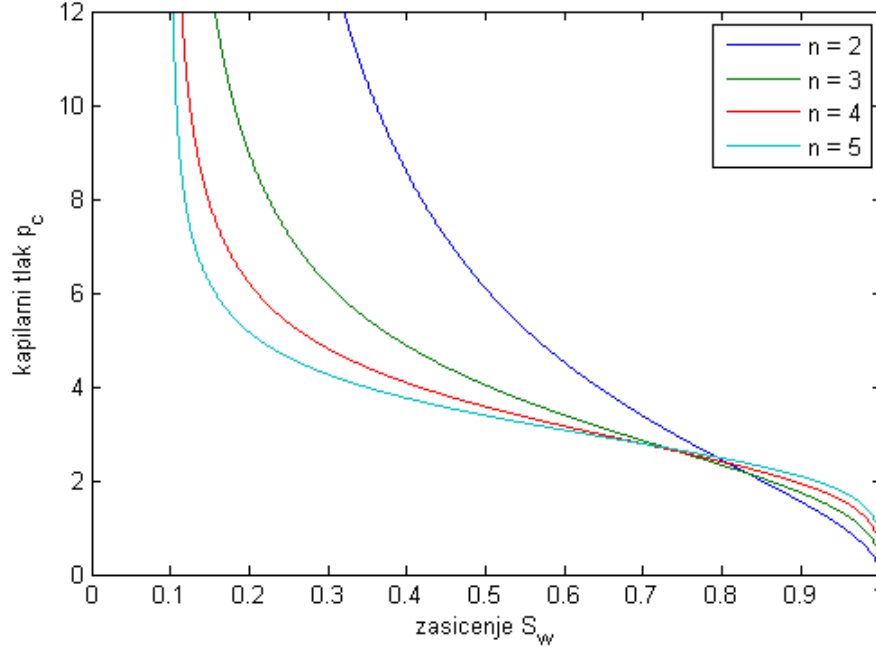
gdje su

- α , m i n - parametri.

Parametar m se najčešće zadaje u ovisnosti o n kao $m = 1 - \frac{1}{n}$. Parametar n se zadaje u rangu od 2 do 5, a parametar α je vezan uz vrijednosti ulaznog tlaka p_d .



Slika 2.2: Primjer Brooks-Coreyve krivulje kapilarnog tlaka p_c za različite vrijednosti λ s parametrima: $p_d = 2.0$, $S_{wr} = 0.1$.



Slika 2.3: Primjer Van Genuchtenove krivulje kapilarnog tlaka za različite vrijednosti od n s parametrima: $\alpha = 0.3333$, $S_{wr} = 0.1$.

2.4 Krivulje relativnih propusnosti

Pri određivanju krivulja relativnih propusnosti k_{rw} i k_{rn} također postoje dva pristupa: eksperimentalna mjerenja i analitički pristup. Analitički pristup koristi vezu između kapilarnog tlaka i relativne propusnosti. Tim pristupom se u dvofaznom sustavu ponovno dolazi do modela Brooks-Coreya i Van Genuchtena.

Brooks-Coreyve funkcije relativnih propusnosti također zapisujemo u ovisnosti o efektivnom zasićenju vlažeće faze S_e :

$$k_{rw}(S_w) = S_e^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}} \quad (2.14)$$

$$k_{rn}(S_n) = (1 - S_e)^2 (1 - S_e^{\frac{2+\lambda}{\lambda}}) \quad (2.15)$$

gdje je parametar λ isti kao za funkciju kapilarnog tlaka.

Van Genuchtenove funkcije relativnih propusnosti su dane jednadžbama

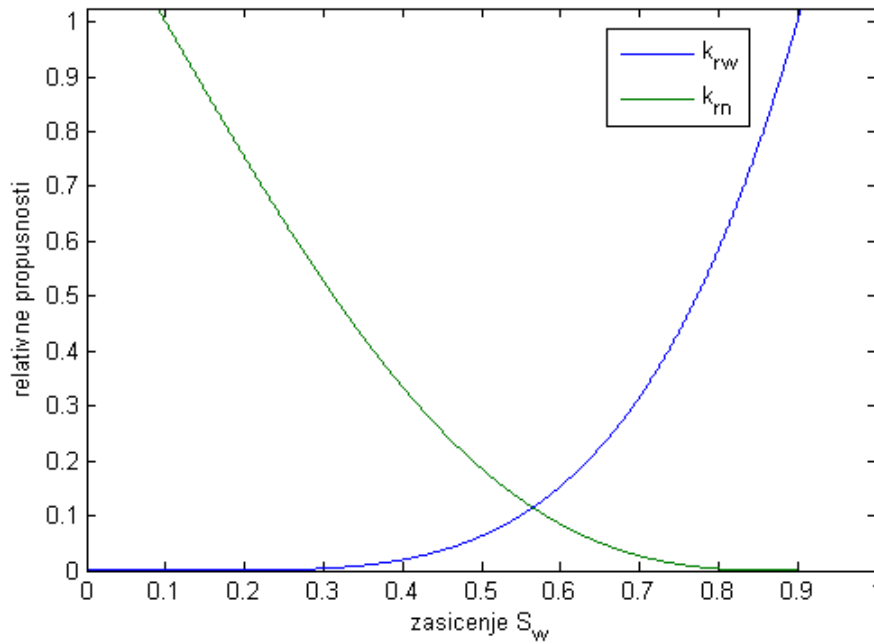
$$k_{rw}(S_w) = S_e^\varepsilon \left(1 - \left(1 - S_e^{\frac{n}{n-1}} \right)^{\frac{n-1}{n}} \right)^2 \quad (2.16)$$

$$k_{rn}(S_n) = (1 - S_e)^\gamma \left(1 - S_e^{\frac{n}{n-1}} \right)^{\frac{2(n-1)}{n}} \quad (2.17)$$

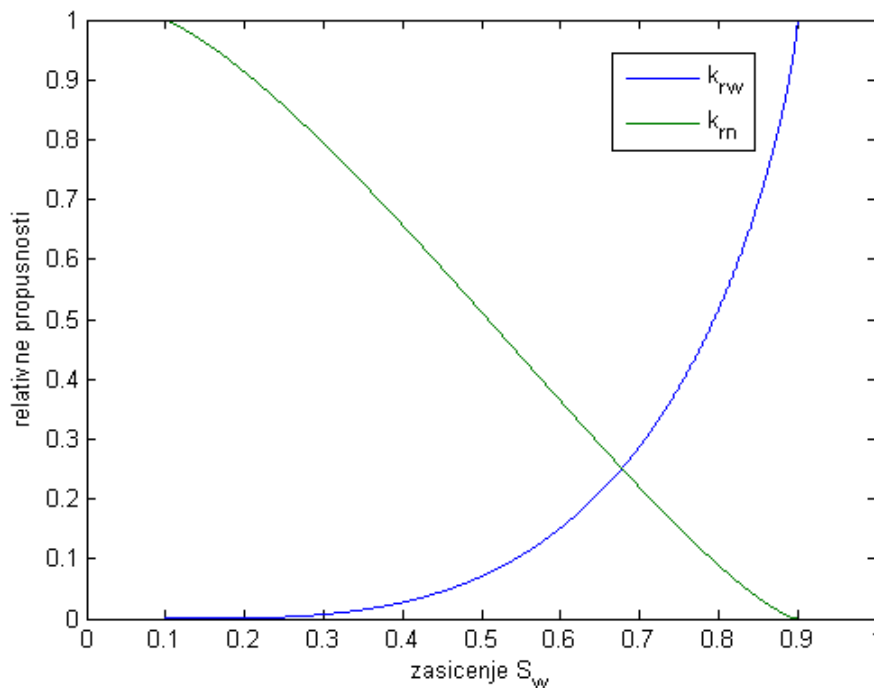
gdje su

- n , ε , i γ - parametri.

Parametri ε i γ najčešće poprimaju vrijednosti $\varepsilon = \frac{1}{2}$ i $\gamma = \frac{1}{3}$, dok je parametar n isti kao i u Van Genuchtenovoj funkciji kapilarnog tlaka.



Slika 2.4: Primjer Brooks-Coreyevih krivulja relativnih propusnosti vlažeće k_{rw} i nevlažeće faze k_{rn} s parametrima: $\lambda = 2.0$, $S_{wr} = S_{nr} = 0.1$.



Slika 2.5: Primjer Van Genuchtenovih krivulja relativnih propusnosti s parametrima: $n = 4$, $\varepsilon = 0.5$, $\gamma = 0.3333$, $S_{wr} = S_{nr} = 0.1$.

2.5 Matematički model dvofaznog toka

Zakon sačuvanja mase

Neka porozna sredina ispunjava ograničenu domenu $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$.

Ovdje nam je bitna pretpostavka da nema prijenosa mase između vlažeće i nevlažeće faze.

Tada je zakon o očuvanju mase svake od faza $\alpha = w, n$ dan jednadžbom

$$\frac{\partial(\Phi S_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \rho_\alpha q_\alpha, \quad (2.18)$$

pri čemu su

- $\Phi(\mathbf{x})$ - poroznost,
- ρ_α - gustoća faze α ,

- $S_\alpha(\mathbf{x}, t)$ - zasićenje faze α ,
- $\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x}, t)$ - Darcyjeva brzina faze α ,
- $q_\alpha(\mathbf{x}, t)$ - funkcija koja opisuje izvor/ponor faze α .

Uočimo da smo poroznost Φ množili sa zasićenjem S_α odgovarajuće faze jer u dvofaznom modelu svaka faza zauzima jedan dio poroznog prostora. Zbog pretpostavki da su gustoće ρ_w i ρ_n konstantne dobivamo

$$\frac{\partial(\Phi S_\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u}_\alpha = q_\alpha. \quad (2.19)$$

Nadalje pretpostavljamo da je i poroznost Φ konstantna pa slijedi

$$\Phi \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u}_\alpha = q_\alpha. \quad (2.20)$$

Diferencijalne jednadžbe dvofaznog toka

Neka su dani ograničena domena $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ i vremenski interval $(0, T)$. Uvrstimo li Darcyjevog zakon (2.11) u zakon o očuvanju mase (2.20) dobivamo sustav od dvije parcijalne diferencijalne jednadžbe sa četiri nepoznanice

$$\begin{cases} \Phi \frac{\partial S_w}{\partial t} = \operatorname{div} [\lambda_w(S_w) \mathbb{K}(\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] + q_w \\ \Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} = \operatorname{div} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_n - \rho_n \mathbf{g})] + q_n, \end{cases} \quad (2.21)$$

uz uvjete

$$\begin{aligned} S_w + S_n &= 1 \\ p_n - p_w &= p_c(S_w). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Klasifikacija modela

Sustav (2.21) na prvu izgleda kao sustav paraboličkih parcijalnih diferencijalnih jednadžbi. Međutim, u slučaju kada su fluidi inkompresibilni zapravo imamo paraboličko-eliptički sustav. Naime, zbrajanjem jednadžbi (2.21)₁ i (2.21)₂ te uvažavanjem uvjeta na zasićenje (2.22)₁ dobivamo

$$0 = \operatorname{div} [\lambda_w \mathbb{K} \nabla p_w - \mathbb{K}(\lambda_w \rho_w + \lambda_n \rho_n) \mathbf{g} + \lambda_n \mathbb{K} \nabla p_n] + q_w + q_n.$$

Prebacimo izraz s gradijentom tlaka p_w na lijevu stranu i od svake strane oduzmemo $\lambda_n \mathbb{K} \nabla p_w$:

$$-\operatorname{div}[(\lambda_w + \lambda_n) \mathbb{K} \nabla p_w] = -\operatorname{div}[\mathbb{K}(\lambda_w \rho_w + \lambda_n \rho_n) \mathbf{g} + \lambda_n \mathbb{K}(\nabla p_w - \nabla p_n)] + q_w + q_n.$$

Iz (2.22)₂ slijedi $\nabla p_n - \nabla p_w = \nabla p_c(S_w)$. Uvažimo li $\nabla p_c(S_w) = \nabla p_c(1 - S_n) = -p'_c \nabla S_n$, dobivamo jednadžbu koja je ekvivalentna jednadžbi (2.21)₁ :

$$-\operatorname{div}[(\lambda_w + \lambda_n) \mathbb{K} \nabla p_w] = -\operatorname{div}[\mathbb{K} (\lambda_w \rho_w + \lambda_n \rho_n) \mathbf{g} + \lambda_n \mathbb{K} p'_c \nabla S_n] + q_w + q_n.$$

Nadalje, uvrstimo li $\nabla p_n = \nabla p_w + \nabla p_c(S_w) = \nabla p_w - p'_c \nabla S_n$ u (2.21)₂ dobivamo jednadžbu koja je ekvivalentna jednadžbi (2.21)₂ :

$$\Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} = \operatorname{div} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_n \mathbf{g}) - \lambda_n(S_n) \mathbb{K} p'_c \nabla S_n] + q_n.$$

Dakle, sustav (2.21) možemo zapisati na sljedeći ekvivalentan način:

$$\begin{cases} -\operatorname{div}[(\lambda_w + \lambda_n) \mathbb{K} \nabla p_w] = -\operatorname{div}[\mathbb{K} (\lambda_w \rho_w + \lambda_n \rho_n) \mathbf{g} + \lambda_n \mathbb{K} p'_c \nabla S_n] + q_w + q_n \\ \Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} = \operatorname{div} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_n \mathbf{g}) - \lambda_n(S_n) \mathbb{K} p'_c \nabla S_n] + q_n. \end{cases} \quad (2.23)$$

Sada vidimo da je prva parcijalna diferencijalna jednadžba iz (2.23) eliptičkog tipa obzirom na tlak p_w . Druga jednadžba iz istog sustava je ili nelinearna hiperbolička ako je $p'_c \equiv 0$ ili parabolička ako kapilarni tlak p_c nije zanemariv.

Kada bi imali kompresibilnost barem jednog fluida, taj fluid bi prvu jednadžbu iz (2.23) pretvorio u paraboličku.

Inicijalni i rubni uvjeti

Za potpun opis matematičkog modela za dvofazni tok, potrebno je još uvesti početne i rubne uvjete.

Neka je $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ ograničena domena s vanjskim rubom $\Gamma = \partial\Omega$ takvim da vrijedi

$$\begin{aligned} \Gamma &= \Gamma_{wD} \cup \Gamma_{wN}, & \Gamma_{wD} \cap \Gamma_{wN} &= \emptyset, \\ \Gamma &= \Gamma_{nD} \cup \Gamma_{nN}, & \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{nN} &= \emptyset. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Rubne uvjete Dirichletovog tipa zadajemo za funkcije tlaka p_w i p_n te funkcije zasićenja S_w i S_n :

$$\begin{aligned} p_w(\mathbf{x}, t) &= p_{wD}(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) &\in \Gamma_{wD} \times (0, T), \\ S_w(\mathbf{x}, t) &= S_{wD}(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) &\in \Gamma_{wD} \times (0, T), \\ p_n(\mathbf{x}, t) &= p_{nD}(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) &\in \Gamma_{nD} \times (0, T), \\ S_n(\mathbf{x}, t) &= S_{nD}(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) &\in \Gamma_{nD} \times (0, T). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Primjetimo da mora vrijediti

$$S_{wD}(\mathbf{x}, t) + S_{nD}(\mathbf{x}, t) = 1, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{wD} \cap \Gamma_{nD}, \quad t \in (0, T)$$

zbog konzistentnosti s uvjetom (2.5).

Rubni uvjeti Neumannovog tipa su dani sa

$$\begin{aligned} -\rho_w \lambda_w(S_w) \mathbb{K}(\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} &= \phi_w(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{wN} \times (0, T), \\ -\rho_n \lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_n - \rho_n \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} &= \phi_n(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{nN} \times (0, T). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Sada inicijalne uvjete zadajemo samo na funkcije zasićenja S_w i S_n pošto je sustav parabolicko-eliptičnog tipa:

$$\begin{aligned} S_w(\mathbf{x}, 0) &= S_{w0}(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ S_n(\mathbf{x}, 0) &= S_{n0}(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Ponovno, zbog (2.5) mora vrijediti

$$S_w(\mathbf{x}, 0) + S_n(\mathbf{x}, 0) = 1, \quad \mathbf{x} \in \Omega.$$

2.6 Formulacija

U modelu dvofaznog toka imamo četiri nepoznanice: p_w, p_n, S_w, S_n i dvije parcijalne diferencijalne jednačbe (2.21). Iz algebarskih uvjeta (2.22) možemo na više načina odabrati dvije primarne varijable.

Formulacija tlak-zasićenje

Uzmimo za primarne varijable tlak vlažeće faze p_w i zasićenje nevlažeće faze S_n . Supstitucijom

$$\begin{cases} S_w = 1 - S_n \\ p_n = p_w + p_c(1 - S_n) \end{cases}$$

slijedi

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_w}{\partial t} &= -\frac{\partial S_n}{\partial t} \\ \nabla p_n &= \nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) \end{aligned}$$

čime dobivamo (p_w, S_n) - formulaciju

$$\begin{cases} -\Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} = \operatorname{div} [\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] + q_w \\ \Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} = \operatorname{div} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] + q_n. \end{cases} \quad (2.28)$$

Početne uvjete zadajemo na funkciju zasićenja S_n

$$S_n(\mathbf{x}, 0) = S_{n0}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (2.29)$$

Rubni uvjet Dirichletovog tipa je dan sa

$$\begin{aligned} p_w(\mathbf{x}, t) &= p_{wD}(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{wD} \times (0, T) \\ S_n(\mathbf{x}, t) &= S_{nD}(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{nD} \times (0, T), \end{aligned} \quad (2.30)$$

te rubni uvjeti Neumannovog tipa

$$\begin{aligned} -\rho_w \lambda_w (1 - S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} &= \phi_w(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{wN} \times (0, T) \\ -\rho_n \lambda_n (S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w + \nabla p_c (1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} &= \phi_n(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{nN} \times (0, T). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Na isti način smo za primarne varijable mogli odabrati tlak nevlažeće faze p_n i zasićenje vlažeće faze S_w te dobiti (p_n, S_w) – formulaciju.

Formulacija tlak-tlak

Za primarne varijable uzimamo tlak vlažeće faze p_w i tlak nevlažeće faze p_n .

Pretpostavljamo da funkcija kapilarnog tlaka p_c ima jedinstven inverz. Supstitucijom

$$\begin{cases} S_w = p_c^{-1}(p_n - p_w) \\ S_n = 1 - p_c^{-1}(p_n - p_w) \end{cases}$$

slijedi

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_w}{\partial t} &= -\frac{\partial p_c^{-1}}{\partial t} \\ \frac{\partial S_n}{\partial t} &= \frac{\partial p_c^{-1}}{\partial t} \end{aligned}$$

čime dobivamo (p_w, p_n) – formulaciju

$$\begin{cases} -\Phi \frac{\partial p_c^{-1}}{\partial t} = \operatorname{div} \left[\lambda_w (p_c^{-1}(p_n - p_w)) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}) \right] + q_w \\ \Phi \frac{\partial p_c^{-1}}{\partial t} = \operatorname{div} \left[\lambda_n (1 - p_c^{-1}(p_n - p_w)) \mathbb{K} (\nabla p_n - \rho_n \mathbf{g}) \right] + q_n. \end{cases} \quad (2.32)$$

Tada su početni uvjeti dani za funkcije tlakova p_w i p_n :

$$\begin{aligned} p_w(\mathbf{x}, 0) &= p_{w0}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \\ p_n(\mathbf{x}, 0) &= p_{n0}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Rubni uvjeti Dirichletovog tipa su također zadani za funkcije tlakova p_w i p_n :

$$\begin{aligned} p_w(\mathbf{x}, t) &= p_{wD}(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) &\in \Gamma_{wD} \times (0, T), \\ p_n(\mathbf{x}, t) &= p_{nD}(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) &\in \Gamma_{nD} \times (0, T). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Neumannovi rubni uvjeti glase:

$$\begin{aligned} -\rho_w \lambda_w(p_c^{-1}(p_n - p_w)) \mathbb{K}(\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} &= \phi_w(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) &\in \Gamma_{wN} \times (0, T), \\ -\rho_n \lambda_n(1 - p_c^{-1}(p_n - p_w)) \mathbb{K}(\nabla p_n - \rho_n \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} &= \phi_n(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) &\in \Gamma_{nN} \times (0, T). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Još jedna moguća formulacija sustava (2.21) je pomoću globalnog tlaka (drugi naziv je formulacija djelomičnog toka; eng. fractional flow formulation). Formulacija pomoću globalnog tlaka je detaljno opisana u [2].

Poglavlje 3

Numerički model dvofaznog toka

U ovom poglavlju opisujemo stabilizaciju numeričkih metoda pomoću upwind metode za diskretizaciju korektivnog člana te njenu primjenu na model dvofaznog toka. Uvodimo diskretizaciju skupa $\Omega \times (0, T)$ te opisujemo metodu konačnih volumena za diferencijalne jednačbe dvofaznog toka u (p_w, S_n) – formulaciji.

3.1 Upwind metoda

Upwind metodu je najlakše opisati u kontekstu metode konačnih diferencija. Promotrimo Cauchyjev problem

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, & x \in \mathbb{R}, t \geq 0 \\ u(x, 0) &= u_0(x). \end{aligned} \tag{3.1}$$

Skup $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_0^+$ na kojem promatramo gornji problem, diskretiziramo strukturiranom mrežom s prostornim korakom Δx i vremenskim korakom Δt . Diskretna mreža točaka (x_i, t^j) je definirana na sljedeći način

$$\begin{aligned} x_i &= i\Delta x, & i \in \mathbb{Z} \\ t^j &= j\Delta t, & j \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Nadalje, pretpostavljamo da je $\frac{\Delta t}{\Delta x} = \text{const.}$ stoga će vremenski korak Δt označavati jedinstvenu mrežu. Vrijednosti rješenja u u točkama diskretizacije (x_i, t^j) ćemo označavati sa u_i^j :

$$u_i^j = u(x_i, t^j). \tag{3.2}$$

Upwind metoda će nam dati aproksimacije (U_i^j) stvarnog rješenja u u točakama (x_i, t^j) . Svakom diskretnom preslikavanju (U_i^j) pridružujemo po dijelovima glatku, konstantu funkciju $U_{\Delta t}(x, t)$ definiranu na $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_0^+$ na sljedeći način

$$U_{\Delta t}(x, t) = U_i^j, \quad (x, t) \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}) \times [t^j, t^{j+1}) \quad (3.3)$$

gdje je $x_{i-1/2} = (i - 1/2)\Delta x$.

Iz početnog uvjeta $u_0(x)$ konstruiramo vektor početnih aproksimacija (U_i^0) :

$$U_i^0 = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u_0(x) dx. \quad (3.4)$$

Radi jednostavnosti ćemo promatrati eksplicitne metode. Rezultati se prenose i na implicitne metode.

Prostornu derivaciju $\partial/\partial x$ zamijenimo centralnim diferencijama. Na taj način dobivamo *metodu centralnih diferencija* iz koje se aproksimacije U_i^{j+1} računaju na sljedeći način:

$$U_i^{j+1} = U_i^j - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}(U_{i+1}^j - U_{i-1}^j). \quad (3.5)$$

Iako je sasvim prirodno na gornji način zamijeniti prostornu derivaciju, pokazuje se da metoda centralnih diferencija nije stabilna te je samim time neupotreblijiva u praksi.

Stoga ćemo prostornu derivaciju $\partial/\partial x$ drugačije računati - koristit ćemo deriviranje u smjeru iz kojeg dolaze informacije. Konkretno, za $a \geq 0$, informacija ide s lijeva na desno pa se za aproksimaciju derivacije $\partial/\partial x$ koriste poznate informacije U_{i-1}^j i U_i^j . Analogno, za $a \leq 0$, informacija ide s desna na lijevo pa se za aproksimaciju derivacije koriste U_i^j i U_{i+1}^j . Na taj način dolazimo do *diferencijske jednadžbe upwind metode*

$$U_i^{j+1} = \begin{cases} U_i^j - \frac{a\Delta t}{\Delta x}(U_i^j - U_{i-1}^j), & a \geq 0 \\ U_i^j - \frac{a\Delta t}{\Delta x}(U_{i+1}^j - U_i^j), & a \leq 0, \end{cases} \quad (3.6)$$

za koju se pokazaje da je stabilna.

Nakon što izračunamo diskretna preslikavanja (U_i^j), zanima nas koliko dobro ona aproksimiraju rješenje u . Definiramo funkciju globalne greške

$$E_{\Delta t}(x, t) = U_{\Delta t}(x, t) - u(x, t) \quad (3.7)$$

kao razliku aproksimativnog i stvarnog rješenja.

Kažemo da metoda *konvergira u normi* $\|\cdot\|$ ako

$$\|E_{\Delta t}(\cdot, t)\| \rightarrow 0 \text{ kada } \Delta t \rightarrow 0, \quad (3.8)$$

za svaki fiksni $t \geq 0$, i sve početne uvjete u_0 .

Željeli bi dokazati da upwind metoda konvergira, međutim to je teško izvedivo direktno iz definicije. Umjesto toga, definirat ćemo konzistentnost i stabilnost metode te iskoristiti tvrdnju Lax-Richtmyerovog teorema [6] koji kaže da je za konzistentne linearne metode, stabilnost nužna i dovoljna za konvergenciju.

Lokalna greška diskretizacije $L_{\Delta t}(x, t)$ je veličina koja pokazuje koliko dobro diferencijalna jednačba opisuje diferencijalnu jednačbu lokalno. $L_{\Delta t}(x, t)$ definiramo tako što u diferencijalnoj jednačbi (3.6) prebacimo sve na lijevu stranu i zamjenimo aproksimativno rješenje U_i^j s pravim rješenjem $u(x, t)$. Dakle,

$$L_{\Delta t}(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta t}[u(x, t + \Delta t) - u(x, t)] + \frac{a}{\Delta x}[u(x, t) - u(x - \Delta x, t)], & a \geq 0 \\ \frac{1}{\Delta t}[u(x, t + \Delta t) - u(x, t)] + \frac{a}{\Delta x}[u(x + \Delta x, t) - u(x, t)], & a \leq 0. \end{cases} \quad (3.9)$$

Kažemo da je metoda *konzistentna* ako

$$\|L_{\Delta t}(\cdot, t)\| \rightarrow 0 \text{ kada } \Delta t \rightarrow 0. \quad (3.10)$$

Razvijem $L_{\Delta t}(x, t)$ u Taylorov red oko $u(x, t)$ pokaže se da je upwind metoda konzistentna.

Kažemo da je metoda *stabilna u odnosu na normu* $\|\cdot\|$ ako za svako vrijeme $T > 0$ postoji konstanta $C_S > 0$ i vremenski korak $\Delta t_0 > 0$ takvi da je

$$\|U^j\| \leq C_S \|U^0\|, \text{ za svaki } j\Delta t \leq T, \Delta t < \Delta t_0. \quad (3.11)$$

Uočimo da je za stabilnost metode dovoljno da je $\|U^{j+1}\| \leq \|U^j\|$.

Pokažimo da je upwind metoda stabilna u ∞ -normi ako vrijedi

$$0 \leq |a| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \quad (3.12)$$

Naime, zapišemo li U_i^{j+1} u sljedećem obliku

$$U_i^{j+1} = U_i^j \left(1 - \frac{|a|\Delta t}{\Delta x}\right) + \frac{|a|\Delta t}{\Delta x} U_{i\pm 1}^j, \quad (3.13)$$

dobivamo da je U_i^{j+1} konveksna kombinacija izraza U_i^j i $U_{i\pm 1}^j$. Stoga je

$$|U_i^{j+1}| \leq \max\{|U_i^j|, |U_{i-1}^j|, |U_{i+1}^j|\}$$

iz čega slijedi

$$\|U^{j+1}\|_{\infty} \leq \|U^j\|_{\infty}.$$

Dakle je upwind metoda konzistentna i stabilna. Lax-Richtmyerov teorem povlači konvergenciju upwind metode.

Direktna generalizacija upwind metode na općenitu Cauchyjevu jednadžbu

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} &= 0, & x \in \mathbb{R}, t \geq 0 \\ u(x, 0) &= u_0(x). \end{aligned} \quad (3.14)$$

je moguća samo ako je $f(u)$ monotona funkcija. Tada je

$$U_i^{j+1} = \begin{cases} U_i^j - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f(U_i^j) - f(U_{i-1}^j)), & f' \geq 0 \\ U_i^j - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f(U_{i+1}^j) - f(U_i^j)), & f' \leq 0. \end{cases} \quad (3.15)$$

Pokažimo stabilnost metode (3.15) u ∞ -normi.

Isključimo li trivijalan slučaj ($U_i^j = U_{i-1}^j = U_{i+1}^j \implies U_i^{j+1} = U_i^j$) aproksimacije U_i^{j+1} za (3.14) možemo zapisati na sljedeći način

$$U_i^{j+1} = \begin{cases} U_i^j - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f(U_i^j) - f(U_{i-1}^j)}{U_i^j - U_{i-1}^j} (U_i^j - U_{i-1}^j), & f' \geq 0 \\ U_i^j - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f(U_{i+1}^j) - f(U_i^j)}{U_{i+1}^j - U_i^j} (U_{i+1}^j - U_i^j), & f' \leq 0. \end{cases} \quad (3.16)$$

Prema teoremu srednje vrijednosti postoje $\bar{U} \in (U_{i-1}^j, U_i^j)$ i $\tilde{U} \in (U_i^j, U_{i+1}^j)$ takvi da vrijedi

$$f'(\bar{U}) = \frac{f(U_i^j) - f(U_{i-1}^j)}{U_i^j - U_{i-1}^j} \quad \text{i} \quad f'(\tilde{U}) = \frac{f(U_{i+1}^j) - f(U_i^j)}{U_{i+1}^j - U_i^j}.$$

Stoga uz uvjet stabilnosti

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max_U |f'(U)| \leq 1 \quad (3.17)$$

dobivamo da se U_i^{j+1} može zapisati kao konveksna kombinacija izraza U_i^j i U_{i+1}^j iz čega slijedi $\|U^{j+1}\|_\infty \leq \|U^j\|_\infty$ odnosno stabilnost metode (3.15).

Za nemonotonu funkciju f treba se koristiti tzv. *Riemannov rješavač*. Više o Riemannovom rješavaču se može naći u [6].

3.2 Prostorna i vremenska diskretizacija

Pretpostavljamo da je domena $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ ograničen poliedarski skup. *Diskretna mreža* \mathcal{T} domene Ω je svaka familija zatvorenih i ograničenih poliedarskih podskupova od Ω za koju vrijedi

- $\bar{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}} K$
- $K \in \mathcal{T}$ je zatvoren poliedarski skup takav da je $\text{Int } K \neq \emptyset$,
- $\forall K, L \in \mathcal{T}, K \neq L, \text{Int } K \cap \text{Int } L = \emptyset$.

Skupove $K \in \mathcal{T}$ zovemo *kontrolni volumeni*.

Integracijom jednadžbi dvofaznog toka po svakom kontrolnom volumenu, zbog operatora divergencije, pod integralima će se naći i rubovi kontrolnih volumena, stoga definiramo skup susjednih elemenata svakog od skupova $K \in \mathcal{T}$

$$\mathcal{N}_K = \{L \in \mathcal{T} : \lambda_{d-1}(K \cap L) > 0\}, \quad (3.18)$$

gdje je λ_{d-1} ($d - 1$)–Lebesgueova mjera.

Točke integracije će činiti familija točaka $(\mathbf{x}_K)_{K \in \mathcal{T}}$, koje zovemo *centri kontrolnih volumena*, za koju vrijedi:

- $\mathbf{x}_K \in K, \forall K \in \mathcal{T}$
- za svaki $L \in \mathcal{N}_K$ pravac $(\mathbf{x}_K, \mathbf{x}_L)$ je okomit na $K \cap L$.

Iz pretpostavki na mrežu \mathcal{T} vidimo da se pri diskretizaciji dvodimenzionalne domene koriste trokuti i četverokuti, te tetraedri i poliedri pri diskretizaciji trodimenzionalne domene. Također, mreža \mathcal{T} prekriva Ω tako da je presjek dva različita kontrolna volumena prazan skup, zajednički vrh, zajednička stranica u dvodimenzionalnom slučaju te zajednička strana u trodimenzionalnom slučaju.

Za potrebe našeg programa, dovoljno je da \mathcal{T} bude strukturirana mreža, stoga nadalje pretpostavljamo

- $\mathcal{T} = \{K_1, K_2, \dots, K_N\}$ je mreža od N kontrolnih volumena koji su za dvodimenzionalnu domenu Ω kvadrati, te kocke za trodimenzionalnu domenu,
- za svaki K , $\mathbf{x}_K \in K$ i sve njegove susjedne kontrolne volumene $L \in \mathcal{N}_K$, $\mathbf{x}_L \in L$ vrijedi $d(\mathbf{x}_K, \mathbf{x}_L) = \Delta \mathbf{x}$.

Vremenska diskretizacija intervala $(0, T)$ je dana brojem koraka J i vremenskim korakom Δt takvima da je

$$t^0 = 0, \quad t^j = j\Delta t, \quad t^{J+1} = T.$$

Diskretizaciju konačnim volumenima \mathcal{D} skupa $\Omega \times (0, T)$ definiramo kao uređenu četvorku

$$\mathcal{D} = (\mathcal{T}, (\mathbf{x}_K)_{K \in \mathcal{T}}, J, (t^j)_{j \in \{0, J+1\}}),$$

gdje je \mathcal{T} diskretna mreža domene Ω , $(\mathbf{x}_K)_{K \in \mathcal{T}}$ familija točaka centara kontrolnih volumena, J broj vremenskih koraka, te $(t^j)_{j \in \{0, J+1\}}$ diskretizacija vremenskog intervala $(0, T)$.

Preslikavanja s $\mathcal{T} \times [0, T]$ u \mathbb{R} ćemo označavati podebljanim slovima s eksponentom D . Konkretno, za nepoznate funkcije zasićenja S_n i tlaka p_w preslikavanja

$$\mathbf{S}_n^D : \mathcal{T} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$$

$$\mathbf{p}_w^D : \mathcal{T} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$$

predstavljaju redom diskretne funkcije zasićenja i tlaka.

Vrijednosti funkcija zasićenja S_n i tlaka p_w u točkama diskretizacije (K, t^j) označavamo

$$S_{nK}^j = S_n(\mathbf{x}_K, t^j),$$

$$p_{wK}^j = p_w(\mathbf{x}_K, t^j).$$

Uz gornje oznake diskretne funkcije možemo zapisati u sljedećem obliku

$$\mathbf{S}_n^D = (S_{nK}^j)_{K \in \mathcal{T}, j \in \{0, J+1\}},$$

$$\mathbf{p}_w^D = (p_{wK}^j)_{K \in \mathcal{T}, j \in \{0, J+1\}}.$$

Svakoj diskretnoj funkciji \mathbf{S}_n^D , \mathbf{p}_w^D pridružujemo aproksimativnu, po dijelovima konstantnu funkciju S_n^D , p_w^D definiranu na $\Omega \times (0, T)$ na sljedeći način

$$S_n^D(\mathbf{x}, t) = S_{nK}^{j+1} \quad \text{za s.s } (\mathbf{x}, t) \in K \times (t^j, t^{j+1}),$$

$$p_w^D(\mathbf{x}, t) = p_{wK}^{j+1} \quad \text{za s.s } (\mathbf{x}, t) \in K \times (t^j, t^{j+1}),$$

za svaki $K \in \mathcal{T}$, i svaki $j \in \{0, \dots, J+1\}$.

3.3 Jednodimenzionalni slučaj

Pogledajmo sada pojednostavljeni jednodimenzionalni model dvofaznog toka. Neka je $\Omega = [0, L] \subset \mathbb{R}$. Pretpostavljamo da su gravitacija i funkcija kapilarnog tlaka zanemarive. Ovdje je tenzor apsolutne propusnosti $k(x)$ skalarna funkcija. Gledamo tok inkompresibil-

nih fluida. Tada su jednadžbe dvofaznog toka dane s

$$\begin{aligned}
 -\frac{\partial S_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u_w) &= q_w, \\
 u_w &= -k_w \frac{\partial}{\partial x}(p_w), \\
 \frac{\partial S_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u_n) &= q_n, \\
 u_n &= -k_n \frac{\partial}{\partial x}(p_w).
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

gdje je $k_\alpha = \lambda_\alpha k$ umnožak mobilnosti faze α i apsolutne propusnosti.

Domenu Ω diskretiziramo uniformnom mrežom kontrolnih volumena $K_i = [x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \dots, M$ takvom da je $x_0 = 0$, $x_M = L$, $x_i = i\Delta x$.

Za točke diskretizacije uzimamo točke koje su centri kontrolnih volumena K_i :

$$x_{i-1/2} = (i - 1/2)\Delta x.$$

Nadalje, vrijednost funkcije f u točki prostorne diskretizacije $x_{i-1/2}$ označavamo s

$$f|_{K_i} = f(x_{i-1/2}) = f_{i-1/2}.$$

Na ovom pojednostavljenom modelu ćemo objasniti na koji način se trebaju računati funkcije mobilnosti i apsolutna propusnost da bi imali neprekidnost flukseva u_w i u_n . Pretpostavljamo da su mobilnosti i apsolutna propusnost po dijelovima konstantne, odnosno konstantne po kontrolnim volumenima K_i .

Integriranjem (3.19)₁ po proizvoljnom kontrolnom volumenu K_i dobivamo

$$-\int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{\partial S_n}{\partial t} dx + \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{\partial}{\partial x}(u_w) dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} q_w dx.$$

Aproksimacijom slijedi

$$-\frac{S_{n,i-1/2}^{j+1} - S_{n,i-1/2}^j}{\Delta t} + \frac{u_{w,i}^{j+1} - u_{w,i-1/2}^{j+1}}{\Delta x} = \frac{q_{w,i-1/2}^{j+1}}{\Delta x}.$$

Primjetimo da znamo izračunati funkcije u točki $x_{i-1/2}$ ali ne i u x_i . U gornjem izrazu vidimo da je $u_{w,i}^{j+1}$ nepoznanica. Možemo ju izračunati iz (3.19)₂ :

$$u_{w,i} = - \left(k_w \frac{\partial}{\partial x}(p_w) \right) \Big|_{x=x_i} \approx -k_{w,i}^* \frac{p_{w,i+1/2} - p_{w,i-1/2}}{\Delta x}.$$

Uočimo da za vrijednost $k_{w,i}^*$ možemo uzeti $k_{w,i-1/2}$ ili $k_{w,i+1/2}$ ili pak nešto treće. $k_{w,i}^*$ ćemo izračunati iz uvjeta da je fluks u_w neprekidan na granici intervala. Neprekidnost fluksa znači da će diskretizacija od $u_{w,i}$ po intervalu K_i i intervalu K_{i+1} biti jednaka tj. da vrijedi:

$$u_{w,i} = -k_{w,i-1/2} \frac{p_{w,i}^* - p_{w,i-1/2}}{\Delta x/2} = -k_{w,i+1/2} \frac{p_{w,i+1/2} - p_{w,i}^*}{\Delta x/2},$$

gdje $p_{w,i}^*$ označava nepoznatu vrijednost funkcije p_w u točki $x = x_i$. Iz gornje jednakosti želimo izraziti $p_{w,i}^*$ da mogli izračunati $k_{w,i}^*$. Računamo

$$\begin{aligned} -(k_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2})p_{w,i}^* &= -k_{w,i-1/2} p_{w,i-1/2} - k_{w,i+1/2} p_{w,i+1/2} \\ p_{w,i}^* &= \frac{k_{w,i-1/2} p_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2} p_{w,i+1/2}}{k_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2}} \end{aligned}$$

Vratimo li $p_{w,i}^*$ u diskretizaciju po K_i dobivamo

$$\begin{aligned} u_{w,i} &= -k_{w,i-1/2} \frac{\frac{k_{w,i-1/2} p_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2} p_{w,i+1/2}}{k_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2}} - p_{w,i-1/2}}{\Delta x/2} \\ u_{w,i} &= -k_{w,i-1/2} \frac{k_{w,i-1/2} p_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2} p_{w,i+1/2} - k_{w,i-1/2} p_{w,i-1/2} - k_{w,i+1/2} p_{w,i-1/2}}{(k_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2})\Delta x/2} \\ &= -k_{w,i-1/2} \frac{k_{w,i+1/2} (p_{w,i+1/2} - p_{w,i-1/2})}{(k_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2})\Delta x/2} \\ &= -\frac{2 k_{w,i-1/2} k_{w,i+1/2}}{k_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2}} \frac{(p_{w,i+1/2} - p_{w,i-1/2})}{\Delta x}. \end{aligned}$$

Slijedi

$$k_{w,i}^* = \frac{2 k_{w,i-1/2} k_{w,i+1/2}}{k_{w,i-1/2} + k_{w,i+1/2}}. \quad (3.20)$$

Analogno bi dobili

$$k_{n,i}^* = \frac{2 k_{n,i-1/2} k_{n,i+1/2}}{k_{n,i-1/2} + k_{n,i+1/2}}. \quad (3.21)$$

Dakle, da bi imali neprekidnost flukseva u_w i u_n na granici kontrolnog volumena, produkt funkcija mobilnosti faze α i apsolutne propusnosti, k_α , u točki x_i na granici moramo računati iz harmonijske sredine od $k_{\alpha,i-1/2}$ i $k_{\alpha,i+1/2}$.

U višedimenzionalnim modelima u kojima gravitacija i kapilarni tlak nisu zanemarivi dobivamo isti rezultat.

Napomena. Mobilnosti λ_α , $\alpha = w, n$ su funkcije zasićenja S_n . Stoga je za vrijednosti $\lambda_{\alpha,i}$ u točki x_i potrebno znati vrijednost zasićenja S_n u točki x_i . Vrijednosti $S_{n,i}$ dobivamo iz upwind metode.

3.4 Metoda konačnih volumena

Sada smo u mogućnosti izvesti metodu konačnih volumena za diferencijalne jednačbe dvofaznog toka u (p_w, S_n) - formulaciji.

Ideja ove metode je direktno integriranje parcijalnih diferencijalnih jednačbi, u ovom slučaju sustava (2.28), po svakom kontrolnom volumenu K te aproksimacija dobivenih integrala pomoću točki centara kontrolnih volumena i upwind metode. Dirichletove i Neumannove rubne uvjete ćemo ugraditi u integrale, a iz početnih uvjeta ćemo konstruirati vektor početnih aproksimacija.

Dakle, integriranjem jednačbi (2.28)₁ i (2.28)₂ po proizvoljnom kontrolnom volumenu K dobivamo

$$-\int_K \Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} d\mathbf{x} - \int_K \operatorname{div}[\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] d\mathbf{x} - \int_K q_w d\mathbf{x} = 0 \quad (3.22)$$

$$\int_K \Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} d\mathbf{x} - \int_K \operatorname{div}[\lambda_n(S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] d\mathbf{x} - \int_K q_n d\mathbf{x} = 0. \quad (3.23)$$

Primjenom Gaussovog teorema slijedi

$$-\int_K \Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} d\mathbf{x} - \int_{\partial K} [\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS - \int_K q_w d\mathbf{x} = 0 \quad (3.24)$$

$$\int_K \Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} d\mathbf{x} - \int_{\partial K} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS - \int_K q_n d\mathbf{x} = 0, \quad (3.25)$$

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

Za aproksimaciju gornjih integrala potrebno je aproksimirati i vremensku derivaciju $\partial/\partial t$. Mogu se koristiti implicitna ili eksplicitna metoda. Ovdje ćemo koristiti implicitnu metodu prema [5].

Korištenjem formule za integraciju u točki centru kontrolnog volumena dobivamo

- $\int_K q_w(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \approx q_w(\mathbf{x}_K, t^{j+1})|K| = q_{wK}^{j+1}|K|,$
- $\int_K q_n(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \approx q_n(\mathbf{x}_K, t^{j+1})|K| = q_{nK}^{j+1}|K|,$
- $\int_K \Phi \frac{\partial S_n(\mathbf{x}, t)}{\partial t} d\mathbf{x} \approx \Phi \frac{S_n(\mathbf{x}_K, t^{j+1}) - S_n(\mathbf{x}_K, t^j)}{\Delta t^j} |K| = \Phi \frac{S_{nK}^{j+1} - S_{nK}^j}{\Delta t^j} |K|,$

pri čemu $|K|$ označava površinu/volumen kontrolnog volumena K u dvije/tri dimenzije. Preostaje nam aproksimirati sljedeće integrale:

$$I_w = - \int_{\partial K} [\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS, \quad (3.26)$$

$$I_n = - \int_{\partial K} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.27)$$

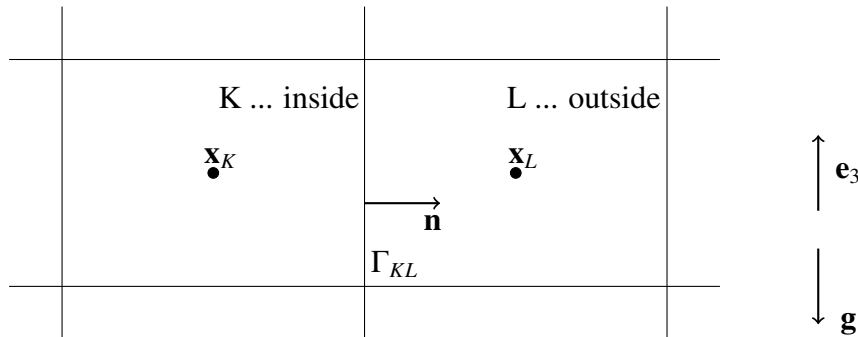
Zbog toga što su I_w i I_n integrali po rubu ∂K , nailazimo na dvije poteškoće.

Prvo, ne znamo koju vrijednost da uzmemo za funkciju zasićenja S_n po rubu ∂K pošto diskretna rješenja računamo u točkama koje su centri kontrolnih volumena. Taj problem rješavamo upwind metodom. Drugo, u ovisnosti o presjeku $\partial K \cap \Gamma$, dobivamo različite vrijednosti integrala. Stoga ćemo razlikovati dva slučaja.

Prisjetimo se da je

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_w &= -\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}), \\ \mathbf{u}_n &= -\lambda_n(S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g}). \end{aligned}$$

1° $K \subset \Omega$, $\partial K \cap \Gamma = \emptyset$



Slika 3.1: Kontrolni volumen K unutar Ω

Bez smanjenja općenitosti, uzмимо za susjedni kontrolni volumen od K , njemu neposredno desni kontrolni volumen; označimo ga s L . Neka su \mathbf{x}_K i \mathbf{x}_L centri od K i L . Označimo $\Delta \mathbf{x} = d(\mathbf{x}_K, \mathbf{x}_L)$. Nadalje, stavimo $\Gamma_{KL} = \partial K \cap \partial L$. Neka je \mathbf{n} vanjska jedinična normala kontrolnog volumena K na rub Γ_{KL} , kao na slici 3.1.

Uz navede oznake, možemo aproksimirati sljedeće integrale

$$I_w^{in} = - \int_{\Gamma_{KL}} [\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS, \quad (3.28)$$

$$I_n^{in} = - \int_{\Gamma_{KL}} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.29)$$

U izrazima pod integralima I_w^{in} i I_n^{in} , vidimo da treba izračunati funkcije mobilnosti λ_w i λ_n , te tenzor apsolutne propusnosti \mathbb{K} . Mobilnosti računamo prema formulama

$$\lambda_w(1 - S_n) = \frac{k_{rw}(1 - S_n)}{\mu_w}, \quad \lambda_n(S_n) = \frac{k_{rn}(S_n)}{\mu_n}.$$

Dakle su te funkcije ovisne o vrijednosti zasićenja S_n . Kako treba izvrijednovati integral po rubu, za S_n možemo uzeti dvije vrijednosti; iz kontrolnog volumena K , ili njegovog susjednog kontrolnog volumena L . Da bi znali koju vrijednost treba uzeti, moramo znati iz kojeg smjera idu tokovi fluida. Dakle, u ovisnosti o predznacima $\mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n}$ te $\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}$ znamo smjer upwind metode. Na primjer, za $\mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n} > 0$ tok vlažećeg fluida ide iz volumena K u volumen L . Raspišimo $\mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n}$ i $\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n} &= -\frac{1}{\mu_w} k_{rw}(1 - S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} \\ &\approx -\frac{1}{\mu_w} k_{rw}(1 - S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}}) \mathbb{K} \left(\frac{p_{wL}^{j+1} - p_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}} + \rho_w g \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n} &= -\frac{1}{\mu_n} k_{rn}(S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} \\ &\approx -\frac{1}{\mu_n} k_{rn}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}}) \mathbb{K} \left(\frac{p_{wL}^{j+1} - p_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}} + \frac{pc(1 - S_{nL}^{j+1}) - pc(1 - S_{nK}^{j+1})}{\Delta \mathbf{x}} + \rho_n g \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right). \end{aligned}$$

Označimo

$$w_w^{in} = - \left(\frac{p_{wL}^{j+1} - p_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}} + \rho_w g \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right), \quad (3.30)$$

$$w_n^{in} = - \left(\frac{p_{wL}^{j+1} - p_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}} + \frac{pc(1 - S_{nL}^{j+1}) - pc(1 - S_{nK}^{j+1})}{\Delta \mathbf{x}} + \rho_n g \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right). \quad (3.31)$$

Funkcije relativnih propusnosti k_{rw} i k_{rn} su svugdje pozitivne, dijagonalna matrica apsolutne propusnosti \mathbb{K} te konstante viskoznosti μ_w , μ_n također, stoga predznak od $\mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n}$ i $\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}$ ovisi o predznacima izraza w_w^{in} i w_n^{in} .

Na temelju smjera toka vlažeće faze za vrijednosti zasićenja S_n uzimamo

- $w_w^{in} \geq 0 \implies \mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n} \geq 0 \dots S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}} = S_{nK}^{j+1}$,
- $w_w^{in} < 0 \implies \mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n} < 0 \dots S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}} = S_{nL}^{j+1}$.

Analogno

- $w_n^{in} \geq 0 \implies \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n} \geq 0 \dots S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}} = S_{nK}^{j+1}$,
- $w_n^{in} < 0 \implies \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n} < 0 \dots S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}} = S_{nL}^{j+1}$.

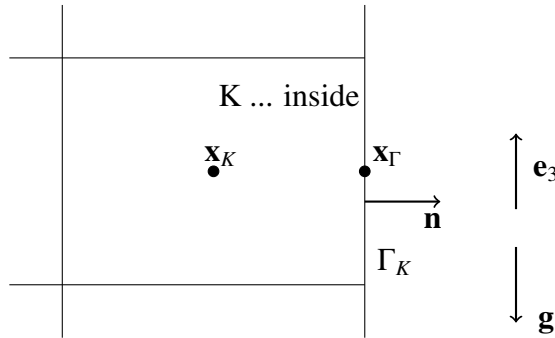
Napomena. Funkcije mobilnosti $\lambda_\alpha|_{\Gamma_{KL}}$ te tenzor apsolutne propusnosti $\mathbb{K}|_{\Gamma_{KL}}$ ćemo računati iz harmonijskih sredina diskretnih funkcija $\lambda_\alpha|_K$ i $\lambda_\alpha|_L$, odnosno $\mathbb{K}|_K$ i $\mathbb{K}|_L$. (Odjeljak 3.3). Uz oznake

$$\delta_w^{in}(S_n|_{\Gamma_{KL}}) = \begin{cases} S_{nK}, & w_w^{in} \geq 0 \\ S_{nL}, & w_w^{in} < 0, \end{cases} \quad \delta_n^{in}(S_n|_{\Gamma_{KL}}) = \begin{cases} S_{nK}, & w_n^{in} \geq 0 \\ S_{nL}, & w_n^{in} < 0, \end{cases}$$

dobivamo

$$\begin{aligned} I_w^{in} &\approx \lambda_w(1 - \delta_w^{in}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}})) \mathbb{K} w_w^{in} |_{\Gamma_{KL}}, \\ I_n^{in} &\approx \lambda_n(\delta_n^{in}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}})) \mathbb{K} w_n^{in} |_{\Gamma_{KL}}. \end{aligned} \tag{3.32}$$

2° $K \subset \Omega$, $\Gamma_K = \partial K \cap \Gamma \neq \emptyset$



Slika 3.2: Kontrolni volumen K na rubu domene

Bez smanjenja općenitosti, neka je desna stranica od K takva da je presjek $\partial K \cap \Gamma$ neprazan. Neka je \mathbf{x}_K centar od K . Označimo sa \mathbf{x}_Γ centar desne stranice (Slika 3.2). Stavimo $\Delta \mathbf{x}_{1/2} = d(\mathbf{x}_K, \mathbf{x}_\Gamma)$. Nadalje, neka je \mathbf{n} vanjska jedinična normala na desnu stranicu

od K . Želimo aproksimirati integrale

$$I_w^{out} = - \int_{\Gamma_K} [\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS, \quad (3.33)$$

$$I_n^{out} = - \int_{\Gamma_K} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.34)$$

Račun neće ići direktno kao u prvom slučaju, već ćemo prvo integrale po rubu Γ_K podijeliti na zbroj više integrala u ovisnosti o rubovima $\Gamma_{\alpha N}$ i $\Gamma_{\alpha D}$, $\alpha = w, n$.

Prema (2.24)₁ je $\Gamma = \Gamma_{wD} \cup \Gamma_{wN}$, stoga integral I_w^{out} definiran sa (3.33) možemo pisati kao

$$I_w^{out} = - \int_{\partial K \cap \Gamma_{wN}} [\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\partial K \cap \Gamma_{wD}} [\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.35)$$

Uvažavajući Neumannov rubni uvjet (2.31)₁ slijedi

$$I_w^{out} = \int_{\partial K \cap \Gamma_{wN}} \frac{\phi_w}{\rho_w} dS - \int_{\partial K \cap \Gamma_{wD}} [\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.36)$$

Slično, prema (2.24)₂ je $\Gamma = \Gamma_{nD} \cup \Gamma_{nN}$, stoga integral I_n^{out} definiran sa (3.34) pišemo

$$I_n^{out} = - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nN}} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.37)$$

Ponovnim rastavom $\Gamma = \Gamma_{wD} \cup \Gamma_{wN}$ te uvažavajući Neumannov rubni uvjet (2.31)₂ slijedi

$$\begin{aligned} I_n^{out} &= \int_{\partial K \cap \Gamma_{nN}} \frac{\phi_n}{\rho_n} dS - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS \\ &\quad - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wD}} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS \\ &= \int_{\partial K \cap \Gamma_{nN}} \frac{\phi_n}{\rho_n} dS - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}} \lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} dS \\ &\quad - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}} \lambda_n(S_n) \mathbb{K} \nabla p_w \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wD}} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w + \nabla p_c(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS. \end{aligned}$$

Označimo

$$I_{w1}^{out} = - \int_{\partial K \cap \Gamma_{wD}} [\lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS, \quad (3.38)$$

$$I_{n1}^{out} = - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}} \lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla pc(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} dS, \quad (3.39)$$

$$I_{n2}^{out} = - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}} \lambda_n(S_n) \mathbb{K} \nabla p_w \cdot \mathbf{n} dS, \quad (3.40)$$

$$I_{n3}^{out} = - \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wD}} [\lambda_n(S_n) \mathbb{K}(\nabla p_w + \nabla pc(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g})] \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.41)$$

Preostale integrale aproksimiramo

- $\int_{\partial K \cap \Gamma_{wN}} \frac{\phi_w(\mathbf{x}, t)}{\rho_w} dS \approx \frac{\phi_w(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1})}{\rho_w} |\partial K \cap \Gamma_{wN}| \approx \frac{\phi_{w\Gamma}^{j+1}}{\rho_w} |\partial K \cap \Gamma_{wN}|,$
- $\int_{\partial K \cap \Gamma_{nN}} \frac{\phi_n(\mathbf{x}, t)}{\rho_n} dS \approx \frac{\phi_n(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1})}{\rho_n} |\partial K \cap \Gamma_{nN}| \approx \frac{\phi_{n\Gamma}^{j+1}}{\rho_n} |\partial K \cap \Gamma_{nN}|,$

pri čemu $|\partial K|$ označava površinu/duljinu granice ∂K u tri/dvije dimenzije.

Ponovno, u ovisnosti o toku fluida, funkcija zasićenja S_n može poprimiti vrijednost iz unutrašnjosti kontrolnog volumena K ili s ruba domene na kojem je zadan Dirichletov rubni uvjet. Da bi izračunali tokove fluida, trebamo izračunati $\nabla p_w \cdot \mathbf{n}$ po rubu Γ_{nD} te $\nabla pc \cdot \mathbf{n}$ po rubu Γ_{wD} . Raspišimo

$$\begin{aligned} \nabla p_w \cdot \mathbf{n} &\approx \frac{p_w(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1}) - p_w(\mathbf{x}_K, t^{j+1})}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} = \frac{p_w(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1}) - p_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} \\ \nabla pc \cdot \mathbf{n} &\approx \frac{pc(1 - S_n(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1})) - pc(1 - S_n(\mathbf{x}_K, t^{j+1}))}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} \\ &= \frac{pc(1 - S_n(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1})) - pc(1 - S_{nK}^{j+1})}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} \end{aligned}$$

U izrazu za integral I_{w1}^{out} , definiranom sa (3.38), točka integracije $\mathbf{x}_\Gamma \in \Gamma_{wD}$, pa zbog Dirichletovog rubnog uvjeta (2.30)₁ slijedi

$$p_w(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1}) = p_{wD}(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1}) = p_{wD\Gamma}^{j+1}. \quad (3.42)$$

Također, u izrazu za integral I_{n1}^{out} , definiranom sa (3.39), točka integracije $\mathbf{x}_L \in \Gamma_{nD}$ pa zbog Dirichletovog rubnog uvjeta (2.30)₂ slijedi

$$S_n(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1}) = S_{nD}(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1}) = S_{nD\Gamma}^{j+1} \quad (3.43)$$

čime dobivamo

$$pc(1 - S_n(\mathbf{x}_\Gamma, t^{j+1})) = pc(1 - S_{nD\Gamma}^{j+1}). \quad (3.44)$$

U izrazu za integral I_{n3}^{out} , definiranom sa (3.41), točka integracije $\mathbf{x}_\Gamma \in \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wD}$, pa zbog Dirichletovih rubnih uvjeta (2.30) vrijedi (3.42) i (3.44). Tada su

$$\begin{aligned} \nabla p_w \cdot \mathbf{n} &\approx \frac{P_{wD\Gamma}^{j+1} - P_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}}, \\ \nabla pc \cdot \mathbf{n} &\approx \frac{pc(1 - S_{nD\Gamma}^{j+1}) - pc(1 - S_{nK}^{j+1})}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}}. \end{aligned}$$

Sada kada imamo aproksimacije gradijenata, možemo izračunati smjer tokova fluida na temelju predznaka izraza $\mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n}$ i $\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n} &= -\frac{1}{\mu_w} k_{rw}(1 - S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} \\ &\approx -\frac{1}{\mu_w} k_{rw}(1 - S_n^{j+1}|_{\Gamma_K}) \mathbb{K} \left(\frac{P_{wD\Gamma}^{j+1} - P_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} + \rho_w g \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n} &= -\frac{1}{\mu_n} k_{rn}(S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w + \nabla pc(1 - S_n) - \rho_n \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} \\ &\approx -\frac{1}{\mu_n} k_{rn}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_K}) \mathbb{K} \left(\frac{P_{wD\Gamma}^{j+1} - P_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} + \frac{pc(1 - S_{nD\Gamma}^{j+1}) - pc(1 - S_{nK}^{j+1})}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} + \rho_n g \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right). \end{aligned}$$

Označimo

$$w_w^{out} = -\left(\frac{P_{wD\Gamma}^{j+1} - P_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} + \rho_w g \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right), \quad (3.45)$$

$$w_n^{out} = -\left(\frac{P_{wD\Gamma}^{j+1} - P_{wK}^{j+1}}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} + \frac{pc(1 - S_{nD\Gamma}^{j+1}) - pc(1 - S_{nK}^{j+1})}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} + \rho_n g \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right). \quad (3.46)$$

Ponovno, kako su funkcije relativnih propusnosti k_{rw} i k_{rn} svugdje pozitivne, kao i dijagonalna matrica apsolutne propusnosti \mathbb{K} te konstante viskoznosti μ_w , μ_n , predznaci od $\mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n}$ i $\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}$ ovise o predznacima izraza w_w^{out} i w_n^{out} respektivno.

Na temelju smjera toka vlažeće faze, za vrijednosti zasićenja S_n uzimamo

- $w_w^{out} \geq 0 \implies \mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n} \geq 0 \dots S_n^{j+1}|_{\Gamma_K} = S_{nK}^{j+1}$,
- $w_w^{out} < 0 \implies \mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n} < 0 \dots S_n^{j+1}|_{\Gamma_K} = S_{nD\Gamma}^{j+1}$.

Analogno

- $w_n^{out} \geq 0 \implies \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n} \geq 0 \dots S_n^{j+1}|_{\Gamma_K} = S_{nK}^{j+1}$,
- $w_n^{out} < 0 \implies \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n} < 0 \dots S_n^{j+1}|_{\Gamma_K} = S_{nD\Gamma}^{j+1}$.

Uz oznake

$$\delta_w^{out}(S_n|_{\Gamma_K}) = \begin{cases} S_{nK}, & w_w^{out} \geq 0 \\ S_{nD\Gamma}^j, & w_w^{out} < 0, \end{cases} \quad \delta_n^{out}(S_n|_{\Gamma_K}) = \begin{cases} S_{nK}, & w_n^{out} \geq 0 \\ S_{nD\Gamma}, & w_n^{out} < 0, \end{cases}$$

možemo izračunati

$$I_{w1}^{out} \approx \lambda_w(1 - \delta_w^{out}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_K})) \mathbb{K} w_w^{out} |\partial K \cap \Gamma_{wD}|,$$

$$I_{n3}^{out} \approx \lambda_n(\delta_n^{out}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_K})) \mathbb{K} w_n^{out} |\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wD}|.$$

Preostaje aproksimirati integrale I_{n1}^{out} i I_{n2}^{out} .

Oba integrala integriramo po dijelu ruba na kojem je zadan Neumannov rubni uvjet vlažećeg fluida, stoga će vrijednosti koje poprima funkcija zasićenja S_n ovisiti o predznaku funkcije ϕ_w iz (2.31)₁. Uvedemo li oznaku

$$\delta_\phi^{out}(S_n|_{\Gamma_K}) = \begin{cases} S_{nK}, & \phi_w|_{\Gamma_K} \geq 0 \\ S_{nD\Gamma}, & \phi_w|_{\Gamma_K} < 0, \end{cases}$$

možemo izračunati integral

$$I_{n1}^{out} \approx -\lambda_n(\delta_\phi^{out}(S_{nK}^{j+1})) \mathbb{K} \left(\frac{pc(1 - S_{nD\Gamma}^{j+1}) - pc(1 - S_{nK}^{j+1})}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} + \rho_n g \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right) |\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}|.$$

Primjetimo da se pod integralom I_{n2}^{out} nalazi gradijent tlaka ∇p_w kojeg ne znamo izravno izračunati na Γ_{wN} . Da bi dobili ∇p_w , ponovno koristimo Neumannov rubni uvjet (2.31)₁ :

$$-\rho_w \lambda_w(1 - S_n) \mathbb{K} (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} = \phi_w \quad \text{na } \Gamma_{wN}. \quad (3.47)$$

Pretpostavimo na trenutak da je $\lambda_w(1 - S_n) > 0$ na $\Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}$. Onda Neumannov rubni uvjet možemo podijeliti sa $\lambda_w(1 - S_n)$:

$$-\mathbb{K} \nabla p_w \cdot \mathbf{n} + \mathbb{K} \rho_w \mathbf{g} \cdot \mathbf{n} = \frac{\phi_w}{\rho_w \lambda_w(1 - S_n)} \quad (3.48)$$

slijedi

$$-\mathbb{K}\nabla p_w \cdot \mathbf{n} = \frac{\phi_w}{\rho_w \lambda_w(1 - S_n)} - \mathbb{K}\rho_w \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}. \quad (3.49)$$

Uvrstimo li jednakost (3.49) u integral I_{n2}^{out} dobivamo

$$I_{n2}^{out} = \int_{\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}} \lambda_n(S_n) \left(\frac{\phi_w}{\rho_w \lambda_w(1 - S_n)} - \mathbb{K}\rho_w \mathbf{g} \cdot \mathbf{n} \right) dS. \quad (3.50)$$

Ostaje pitanje zašto smo mogli pretpostaviti da je $\lambda_w(1 - S_n) > 0$.

Naime, pretpostavimo li da je na granici $\Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN} \neq \emptyset$ zadano $S_n = 1.0$ i $\phi_w > 0$ ili $\phi_w < 0$, slijedi da se u poroznoj sredini koja ne sadrži vlažeću fazu, odvija tok vlažeće faze. Kako to fizički nije moguće, isključujemo takav slučaj. Dakle za $\Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN} \neq \emptyset$, mora vrijediti $S_n < 1.0$, iz čega slijedi $\lambda_w(1 - S_n) > 0$.

Sada je aproksimacija integrala I_{n2}^{out} dana sa

$$I_{n2}^{out} \approx \lambda_n(\delta_\phi^{out}(S_{nK}^{j+1})) \left(\frac{\phi_{w\Gamma}^{j+1}}{\rho_w \lambda_w(1 - \delta_\phi^{out}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_K}))} + \mathbb{K}\rho_w \mathbf{g} \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right) |\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}|.$$

Nakon što smo odredili sve nepoznate integrale, možemo zapisati aproksimirani oblik integrala I_w^{out} i I_n^{out} :

$$I_w^{out} \approx \frac{\phi_{w\Gamma}^{j+1}}{\rho_w} |\partial K \cap \Gamma_{wN}| + \lambda_w(1 - \delta_w^{out}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_K})) \mathbb{K} w_w^{out} |\partial K \cap \Gamma_{wD}|, \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned} I_n^{out} \approx & \frac{\phi_{n\Gamma}^{j+1}}{\rho_n} |\partial K \cap \Gamma_{nN}| + \lambda_n(\delta_n^{out}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_K})) \mathbb{K} w_n^{out} |\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wD}| \\ & + \lambda_n(\delta_\phi^{out}(S_{nK}^{j+1})) |\partial K \cap \Gamma_{nD} \cap \Gamma_{wN}| \left(\frac{\phi_{w\Gamma}^{j+1}}{\rho_w \lambda_w(1 - \delta_\phi^{out}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_K}))} + \mathbb{K}(\rho_w - \rho_n) \mathbf{g} \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n} \right. \\ & \left. - \frac{pc(1 - S_{nD\Gamma}^{j+1}) - pc(1 - S_{nK}^{j+1})}{\Delta \mathbf{x}_{1/2}} \right). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Sada kada znamo kako se računaju integrali I_w^{in} , I_n^{in} , I_w^{out} i I_n^{out} , možemo aproksimirati integrale I_w i I_n na proizvoljnom kontrolnom volumenu K .

Rub ∂K proizvoljnog kontrolnog volumena K možemo zapisati kao disjunktну uniju

$$\partial K = \bigcup_{L \in \mathcal{N}_K} \Gamma_{KL} \cup (\partial K \cap \Gamma).$$

Uvedemo li oznaku

$$\delta_\Gamma(\partial K) = \begin{cases} 1, & \partial K \cap \Gamma \neq \emptyset \\ 0, & \partial K \cap \Gamma = \emptyset, \end{cases}$$

slijedi da integrale I_w te I_n možemo pisati kao zbrojeve

$$I_w = \sum_{L \in \mathcal{N}_K} I_w^{in} + \delta_\Gamma(\partial K) I_w^{out}, \quad (3.53)$$

$$I_n = \sum_{L \in \mathcal{N}_K} I_n^{in} + \delta_\Gamma(\partial K) I_n^{out}. \quad (3.54)$$

Dakle,

$$I_w \approx \sum_{L \in \mathcal{N}_K} \lambda_w (1 - \delta_w^{in}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}})) \mathbb{K} w_w^{in} |\Gamma_{KL}| + \delta_\Gamma(\partial K) I_w^{out}, \quad (3.55)$$

$$I_n \approx \sum_{L \in \mathcal{N}_K} \lambda_n (\delta_n^{in}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}})) \mathbb{K} w_n^{in} |\Gamma_{KL}| + \delta_\Gamma(\partial K) I_n^{out}, \quad (3.56)$$

gdje su I_w^{out} i I_n^{out} redom dani s (3.51) i (3.52).

Konačno dobivamo aproksimirani oblik jednadžbi (3.24) i (3.25):

$$-\Phi \frac{S_{nK}^{j+1} - S_{nK}^j}{\Delta t} |K| + I_w - q_{wK}^j |K| = 0 \quad (3.57)$$

$$\Phi \frac{S_{nK}^{j+1} - S_{nK}^j}{\Delta t} |K| + I_n - q_{nK}^j |K| = 0,$$

za svaki kontrolni volumen $K \in \mathcal{T}$ i svaki $j \in \{0, \dots, J+1\}$.

Preostaje inicijalizirati početnu aproksimaciju iz početnog uvjeta za funkciju zasićenja S_n :

$$S_{nK}^0 = \frac{1}{|K|} \int_K S_{n0}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3.58)$$

gdje je $|K|$ površina/volumen kontrolnog volumena K u dvije/tri dimenzije.

Konačni oblik metode konačnih volumena za diferencijalne jednadžbe dvofaznog toka u (p_w, S_n) – formulaciji je dan sustavom jednadžbi (3.57) i početnom aproksimacijom (3.58).

Napomena. U primjerima koje ćemo riješiti u idućem poglavlju, pretpostavljamo da je domena Ω pravokutnik ili kvadrat u \mathbb{R}^2 . Nadalje, pretpostavljamo da je

$$\partial\Omega = \Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N,$$

odnosno da su za obje faze na istim dijelovima granice zadani Dirichletovi i Neumannovi rubni uvjeti. Aproximacija integrala I_w^{in} i I_n^{in} će ostati ista dok će aproksimacija integrala I_w^{out} i I_n^{out} biti nešto jednostavnija:

$$\begin{aligned} I_w^{in} &\approx \lambda_w(1 - \delta_w^{in}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}})) \mathbb{K} w_w^{in} |\Gamma_{KL}| \\ I_n^{in} &\approx \lambda_n(\delta_n^{in}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_{KL}})) \mathbb{K} w_n^{in} |\Gamma_{KL}| \\ I_w^{out} &\approx \frac{\phi_w^{j+1}}{\rho_w} |\partial K \cap \Gamma_N| + \lambda_w(1 - \delta_w^{out}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_K})) \mathbb{K} w_w^{out} |\partial K \cap \Gamma_D| \\ I_n^{out} &\approx \frac{\phi_n^{j+1}}{\rho_n} |\partial K \cap \Gamma_N| + \lambda_n(\delta_n^{out}(S_n^{j+1}|_{\Gamma_K})) \mathbb{K} w_n^{out} |\partial K \cap \Gamma_D|, \end{aligned}$$

gdje su w_w^{in} , w_n^{in} , w_w^{out} i w_n^{out} redom definirane s (3.30), (3.31), (3.45) i (3.46). Stoga ćemo (3.24) i (3.25) u primjerima računati prema

$$\begin{aligned} -\Phi \frac{S_{nK}^{j+1} - S_{nK}^j}{\Delta t} |K| + \sum_{L \in \mathcal{N}_K} I_w^{in} + \delta_\Gamma(\partial K) I_w^{out} - q_{wK}^{j+1} |K| &= 0 \\ \Phi \frac{S_{nK}^{j+1} - S_{nK}^j}{\Delta t} |K| + \sum_{L \in \mathcal{N}_K} I_n^{in} + \delta_\Gamma(\partial K) I_n^{out} - q_{nK}^{j+1} |K| &= 0. \end{aligned} \tag{3.59}$$

Napomena. U [5] je, uz određene uvjete na funkcije relativnih propusnosti k_{rw} , k_{rn} , funkciju kapilarnog tlaka p_c te diskretizaciju \mathcal{D} , dokazano postojanje barem jednog rješenja modela dvofaznog toka u (p_w, S_n) – formulaciji pomoću metode konačnih volumena. Jedinstvenost rješenja ostaje otvoreno pitanje.

Poglavlje 4

Test primjeri

Za rješavanje inicijalno-rubne zadaće dvofaznog sustava koristimo metodu konačnih volumena. Software u kojem radimo simulacije je DUNE. Postupak rješavanja je sljedeći:

- u main funkciji konstruiramo pravokutnu domenu i diskretiziramo ju mrežom kvadrata pomoću klase **Dune::YaspGrid**.
- Za konačni element uzimamo \mathbb{P}_0 element (konstante na konačnim volumenima) kojeg dobivamo iz klase **Dune::PDELab::P0FiniteElementMap**.
- Klasa **Dune::PDELab::P0ParallelConstraints** nalazi ograničenja koja se primjenjuju na stupnjeve slobode. O tipu matrica i vektora koji se koriste u diskretnom sustavu se brine klasa **Dune::PDELab::ISTLVectorBackend**.
- Kreiramo klasu *TwoPhaseParameter* u kojoj se nalaze parametri koji opisuju svojstva porozne sredine i fluida te rubne uvjete.
- Kreiramo klase početnih uvjeta.
- Definiramo diskretnu jednadžbu koju rješavamo, odnosno definiramo diskretne lokalne operatore: prostorni *TwoPhaseTwoPointFluxOperator* i vremenski *TwoPhaseOnePointTemporalOperator*. Pomoću klase **Dune::PDELab::GridOperator** od lokalnih operatora dobivamo globalne operatore koji se brinu o doprinosu lokalnih reziduala i jakobijana globalnima.
- Prostorni i vremenski grid operator spajamo u jedan operator pomoću klase **Dune::PDELab::OneStepGridOperator**.
- Kreiramo vektor koeficijenata početnih uvjeta.

- Odabiremo iterativnu metodu **PDELab::ISTLBackend_BCGS_AMG_SSOR** koju dajemo klasi **PDELab::Newton** iz koje dobivamo solver za nelinearni sustav za svaki vremenski korak.
- Odabiremo metodu vremenske diskretizacije:
eksplicitnu **Dune::PDELab::Alexander2Parameter**
implicitnu **Dune::PDELab::OneStepThetaParameter**
- Uzimamo jednokoračnu vremensku diskretizaciju **Dune::PDELab::OneStepMethod**.
- Ispišemo vektor inicijalnih uvjeta pomoću klase **Dune::VTKWriter**.
- U petlji po vremenskim koracima (timesteps), za svaki vremenski korak (timestep) rješavamo sustav te vršimo vizualizaciju pomoću klase **Dune::VTKWriter**.

Napomena. U sva tri primjera pretpostavljamo da nema ponora niti izvora nijednog fluida stoga je $q_w(\mathbf{x}, t) = q_n(\mathbf{x}, t) = 0.0$.

4.1 Prvi primjer

Primjer rješavamo na domeni $\Omega = (0, 300) \times (0, 300) [m^2]$.

Svojstva porozne sredine su dana u tablici 4.1. Ovdje pretpostavljamo su gravitacija i funkcija kapilarnog tlaka zanemarive. Krivulje relativnih propusnosti su dane na slici 4.1.

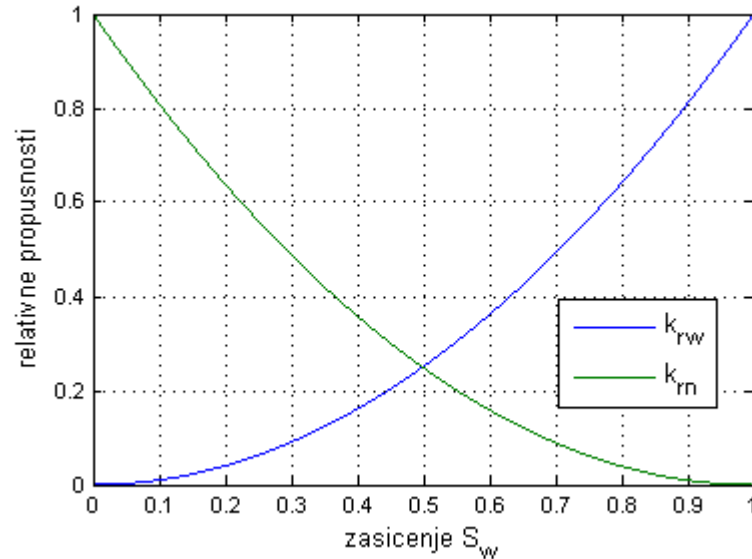
poroznost $\Phi [-]$	0.2
apsolutna propusnost $\mathbb{K} [m^2]$	10^{-7}

Tablica 4.1: Svojstva porozne sredine

Dirichletove rubne uvjete zadajemo u donjem lijevom kutu i gornjem desnom kutu, oba dimenzija $2.5 \times 2.5 [m^2]$, i označavamo s Γ_{D1} i Γ_{D2} respektivno. Domenu $\Omega = 300 \times 300 [m^2]$ diskretiziramo sa 120×120 kontrolnih volumena tako da donji i gornji kut predstavljaju redom točkaste izvore utoka i ponora nafte. Neumannove rubne uvjete zadajemo na preostalom dijelu granice.

Svojstva fluida

$$\begin{aligned} \rho_w &= 1000 [kg/m^3] & \rho_n &= 1000 [kg/m^3] \\ \mu_w &= 10^{-3} [Pa s] & \mu_n &= 10^{-3} [Pa s]. \end{aligned}$$



Slika 4.1: Krivulje relativnih propusnosti

Početni uvjeti

$$p_{w0}(\mathbf{x}) = p_{w0}(x, y) = 20 \cdot 10^5 [Pa]$$

$$S_{n0}(x, y) = 0.8 [-].$$

Rubni uvjeti

$$\Gamma_N \quad \dots \quad \phi_w(x, y) = 0.0$$

$$\phi_n(x, y) = 0.0$$

$$\Gamma_{D1} \quad \dots \quad p_{wD}(x, y) = 28 \cdot 10^5 [Pa]$$

$$S_{nD}(x, y) = 0.2 [-]$$

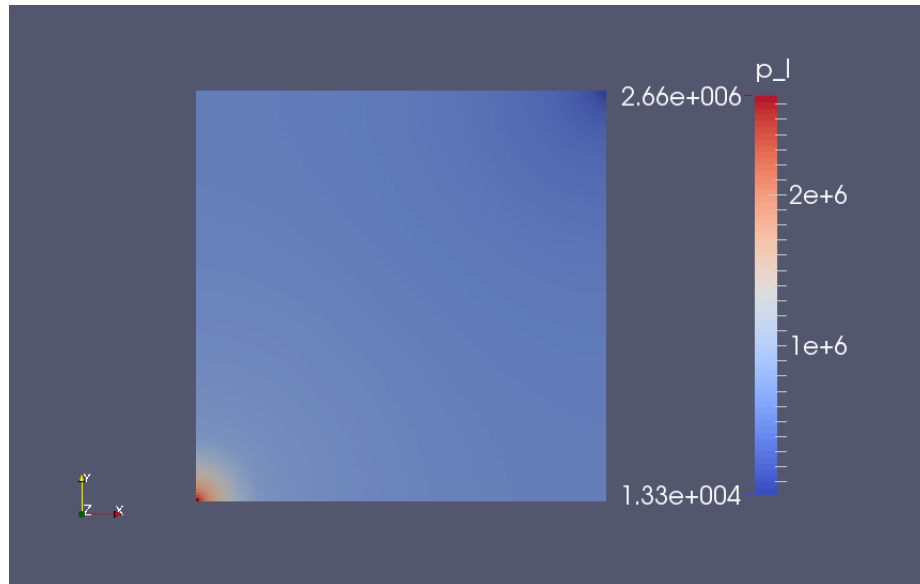
$$\Gamma_{D2} \quad \dots \quad p_{wD}(x, y) = 20 \cdot 10^5 [Pa]$$

$$S_{nD}(x, y) = 0.8 [-].$$

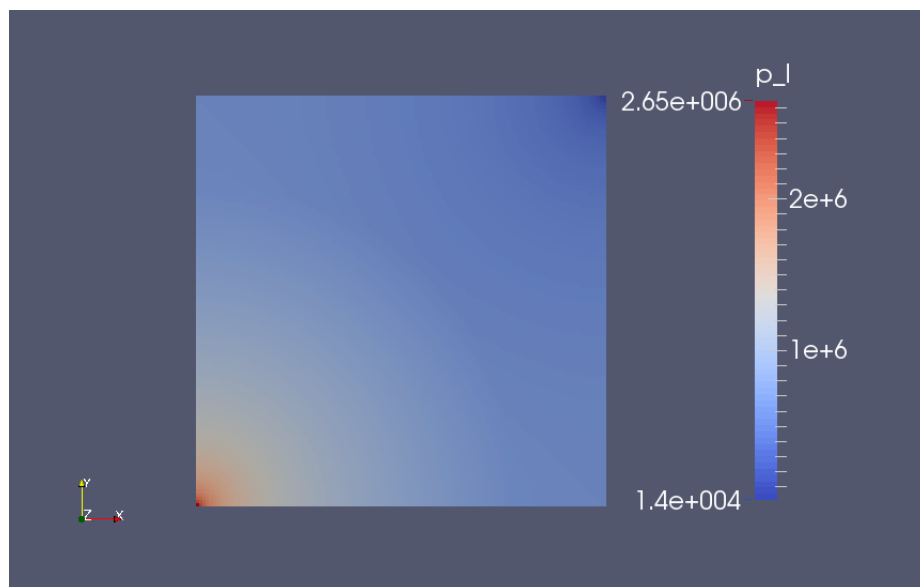
Mreža i vremenski korak

Mreža domene na levelu 0 ima 15×15 kontrolnih volumena. Nakon 3 levela profinjenja dobivamo uniformnu mrežu s 120×120 kontrolnih volumena te 246 786 vrhova. Koristimo 100 vremenskih koraka (timesteps) s vremenskim korakom (timestep) $\Delta t = 20 [s]$.

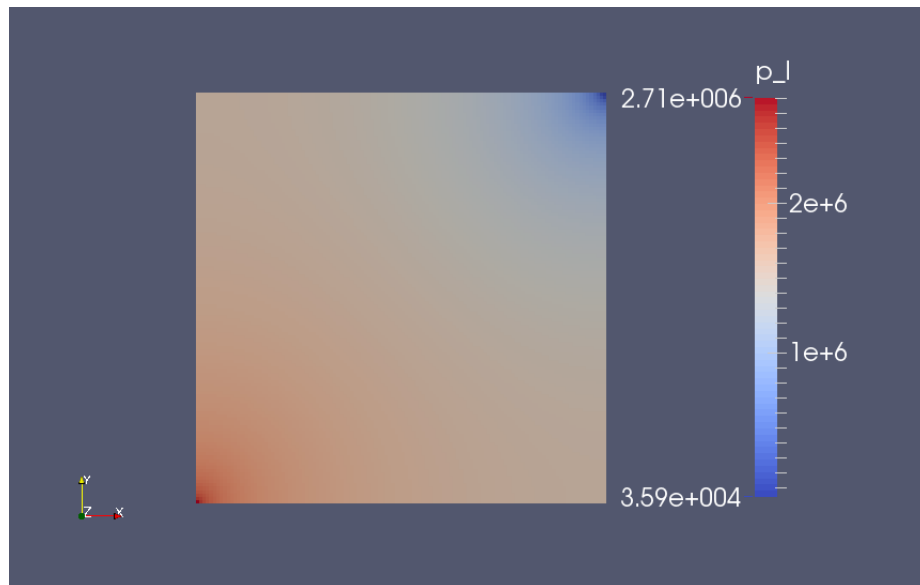
Rezultati



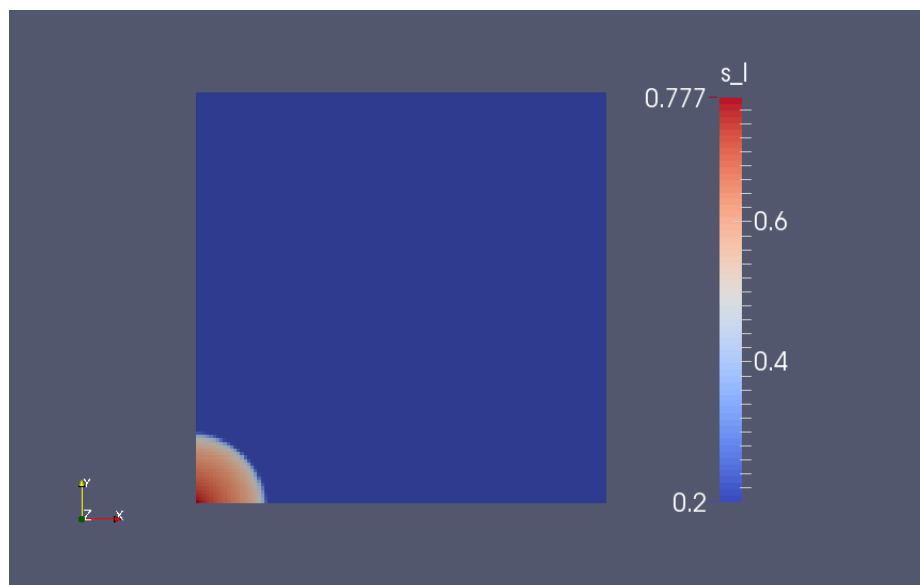
Slika 4.2: Tlak vode nakon 20 sekundi



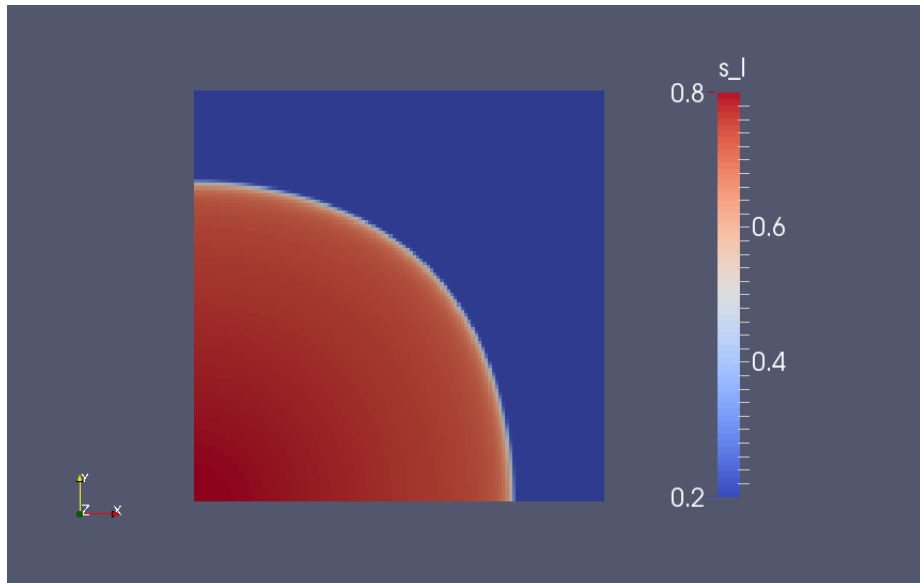
Slika 4.3: Tlak vode nakon 10 minuta



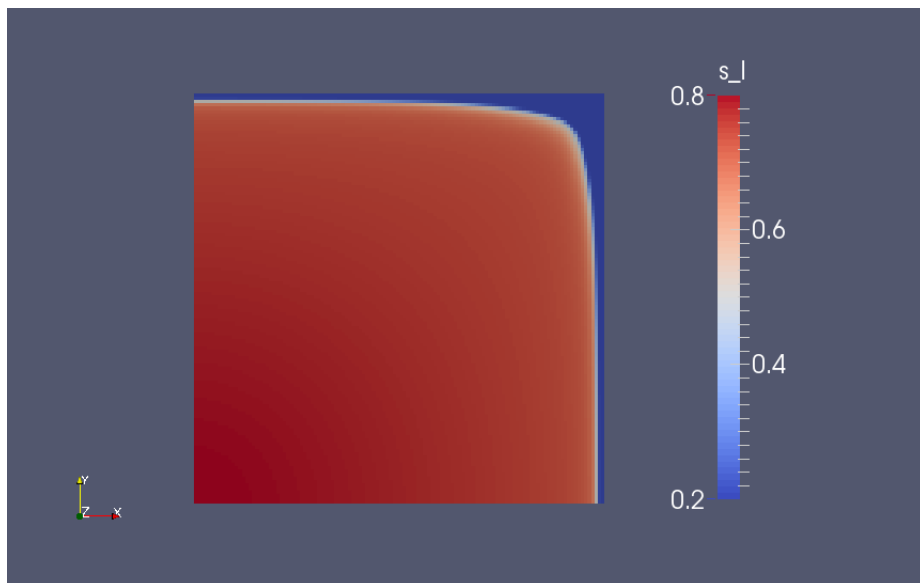
Slika 4.4: Tlak vode nakon 33 minute i 20 sekundi



Slika 4.5: Zasićenje vodom nakon 20 sekundi



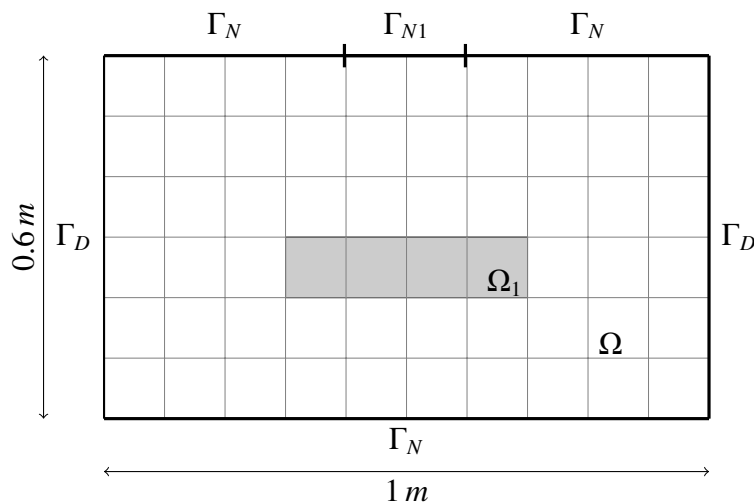
Slika 4.6: Zasićenje vodom nakon 10 minuta



Slika 4.7: Zasićenje vodom nakon 20 minuta

4.2 Drugi primjer

Primjer radimo prema podacima iz [2] na domeni $\Omega = (0, 1) \times (0, 0.6) [m^2]$.



Slika 4.8: Domena inicijalno-rubne zadaće dvofaznog toka.

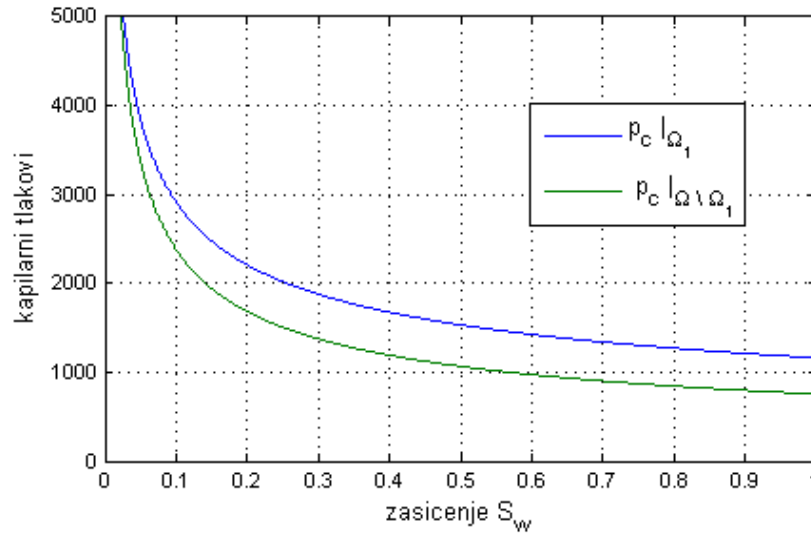
Domena Ω se sastoji od dvije poddomene Ω_1 i $\Omega \setminus \Omega_1$. Zadavanjem različitih svojstava na poddomenama (tablica 4.2), modeliramo makroskopsku heterogenost porozne sredine. Ω_1 predstavlja finiji pijesak, a $\Omega \setminus \Omega_1$ grublji.

	Ω_1	$\Omega \setminus \Omega_1$
poroznost $\Phi [-]$	0.4	0.4
ulazni tlak $p_d [Pa]$	1163.0	755.0
parametar $\lambda [-]$	2.5	2.0
apsolutna propusnost $\mathbb{K} [m^2]$	$6.64 \cdot 10^{-11}$	$3.32 \cdot 10^{-11}$

Tablica 4.2: Svojstva porozne sredine

Za funkcije kapilarnog tlaka koristimo Brooks-Coreyjev model s različitim parametrima λ i različitim ulaznim tlakovima p_d u ovisnosti o poddomenama (slika 4.9). Krivulje relativnih propusnosti su iste kao one u Primjeru 1 (slika 4.1).

Dirichletove rubne uvjete zadajemo na desnom i lijevom rubu od Ω , a Neumannove rubne uvjete na gornjem i donjem rubu (slika 4.8).



Slika 4.9: Krivulje kapilarnog tlaka

Svojstva fluida

$$\begin{aligned} \rho_w &= 1000 \text{ [kg/m}^3\text{]} & \rho_n &= 1460 \text{ [kg/m}^3\text{]} \\ \mu_w &= 10^{-3} \text{ [Pa s]} & \mu_n &= 0.9 \cdot 10^{-3} \text{ [Pa s]}. \end{aligned}$$

Početni uvjeti

$$\begin{aligned} p_{w0}(\mathbf{x}) &= p_{w0}(x, y) = (0.65 - y) \cdot 9810.0 \text{ [Pa]} \\ S_{n0}(x, y) &= 0.0 \text{ [-]}. \end{aligned}$$

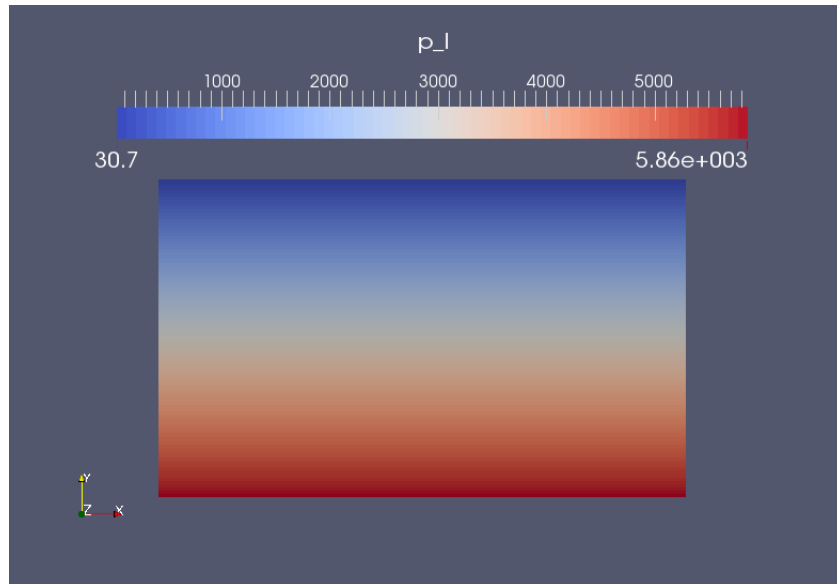
Rubni uvjeti

$$\begin{aligned} \Gamma_N \dots \phi_w(x, y) &= 0.0 \\ \phi_n(x, y) &= 0.0 \\ \Gamma_{N1} \dots \phi_w(x, y) &= 0.0 \\ \phi_n(x, y) &= -0.075 \text{ [kg/(s m}^2\text{)]} \\ \Gamma_D \dots p_{wD}(x, y) &= (0.65 - y) \cdot 9810.0 \text{ [Pa]} \\ S_{nD}(x, y) &= 0.0 \text{ [-]}. \end{aligned}$$

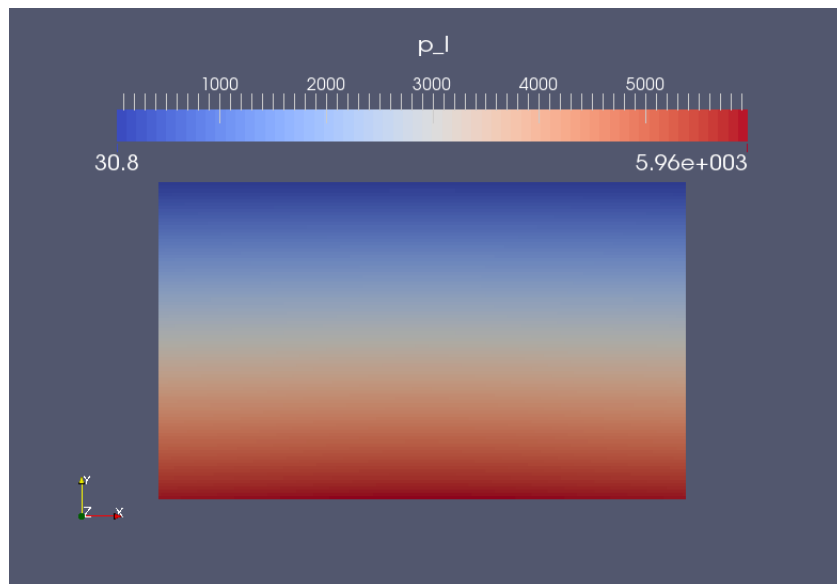
Mreža i vremenski korak

Mreža domene na levelu 0 ima 6×10 kontrolnih volumena. Nakon 4 levela profinjenja dobivamo uniformnu mrežu s 96×160 kontrolnih volumena te 15 617 vrhova. Koristimo 150 vremenskih koraka (timesteps) s vremenskim korakom (timestep) $\Delta t = 60$ [s].

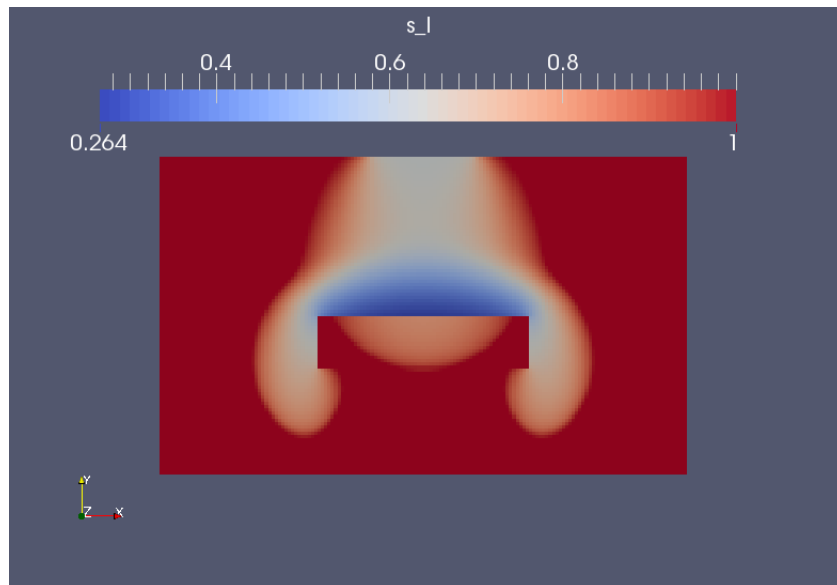
Rezultati



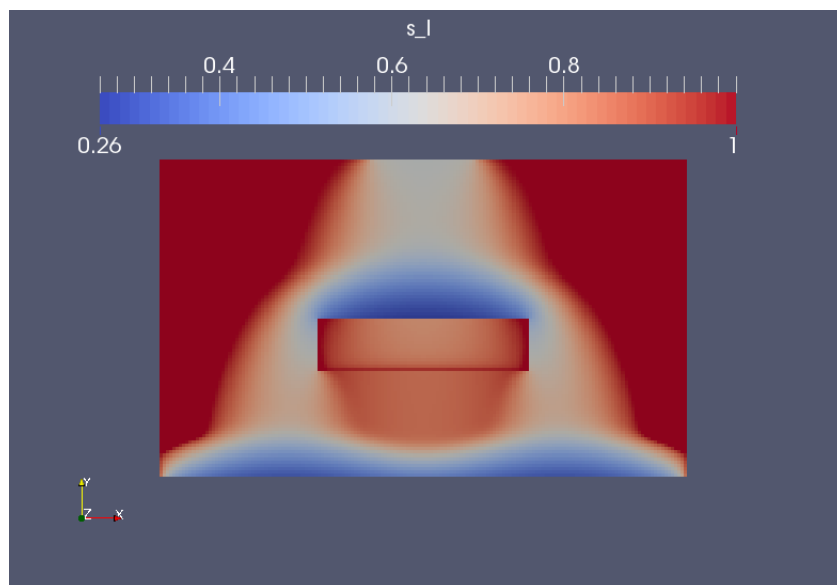
Slika 4.10: Tlak vode nakon 0 minuta



Slika 4.11: Tlak vode nakon 75 minuta



Slika 4.12: Zasićenje vodom nakon 40 minuta



Slika 4.13: Zasićenje vodom nakon 75 minuta

4.3 Treći primjer

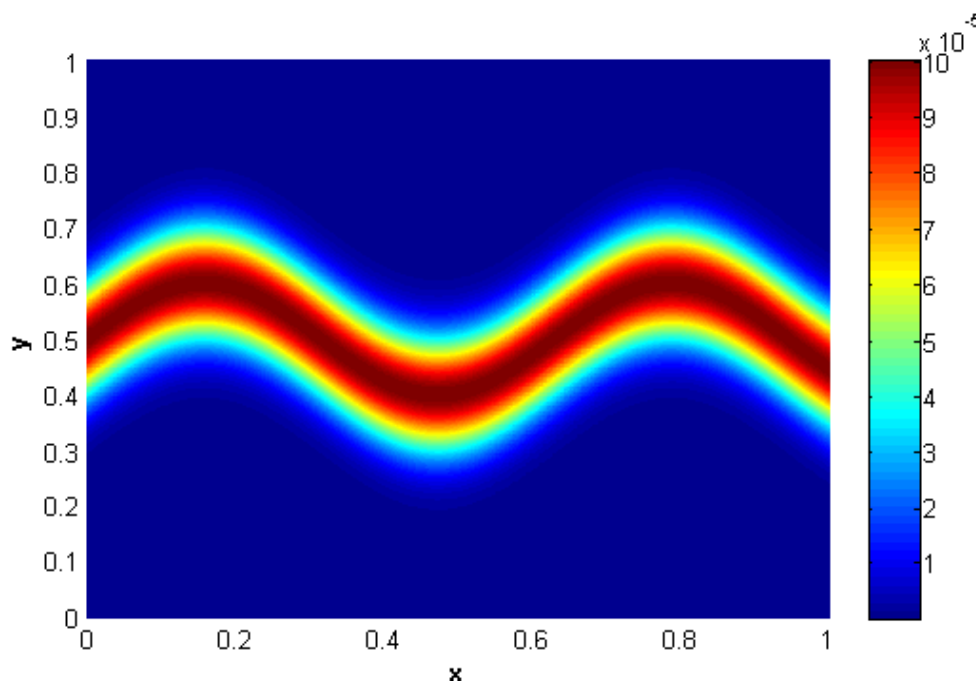
Primjer radimo prema podacima iz [4] na domeni $\Omega = (0, 1) \times (0, 1) [m^2]$.

Pretpostavljamo da je gravitacija zanemariva. Za propusnost uzimamo $\Phi = 1.0$. Tenzor apsolutne propusnosti $\mathbb{K}(\mathbf{x}) = k(\mathbf{x}) \mathbf{I}$ je zadan funkcijom (slika 4.14)

$$k(\mathbf{x}) = \max \left\{ \exp \left(- \left(\frac{y - 0.5 - 0.1 \cdot \sin(10x)}{0.1} \right)^2 \right) \cdot 10^{-4}, 0.01 \cdot 10^{-6} \right\}.$$

Za funkciju kapilarnog tlaka p_c koristimo Van Genuchtenov model (slika 4.15). Krivlje relativnih propusnosti su dane na slici 4.1.

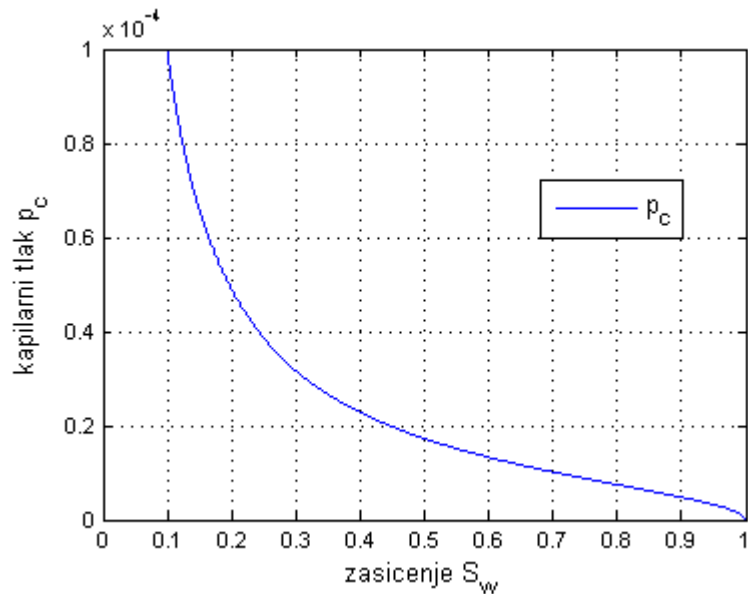
Dirichletove rubne uvjete zadajemo na desnom i lijevom rubu od Ω i označavamo s Γ_{D1} i Γ_{D2} respektivno. Neumannove rubne uvjete zadajemo na preostalom dijelu granice i označavamo s Γ_N .



Slika 4.14: Propusnost

Svojstva fluida

$$\begin{aligned} \rho_w &= 1000 [kg/m^3] & \rho_n &= 1000 [kg/m^3] \\ \mu_w &= 0.2 [Pa s] & \mu_n &= 1.0 [Pa s]. \end{aligned}$$



Slika 4.15: Krivulja kapilarnog tlaka

Početni uvjeti

$$p_{w0}(\mathbf{x}) = p_{w0}(x, y) = 1.0 - x \text{ [Pa]}$$

$$S_{n0}(x, y) = 0.95 \text{ [-]}.$$

Rubni uvjeti

$$\Gamma_N \dots \phi_w(x, y) = 0.0$$

$$\phi_n(x, y) = 0.0$$

$$\Gamma_{D1} \dots p_{wD}(x, y) = 1.0 - x \text{ [Pa]}$$

$$S_{nD}(x, y) = 0.0 \text{ [-]}$$

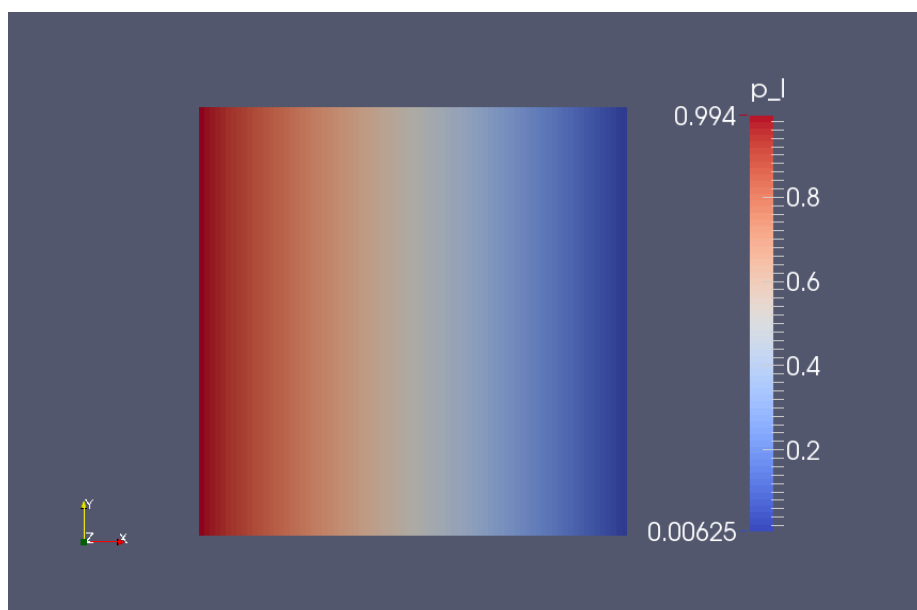
$$\Gamma_{D2} \dots p_{wD}(x, y) = 1.0 - x \text{ [Pa]}$$

$$S_{nD}(x, y) = 0.95 \text{ [-]}.$$

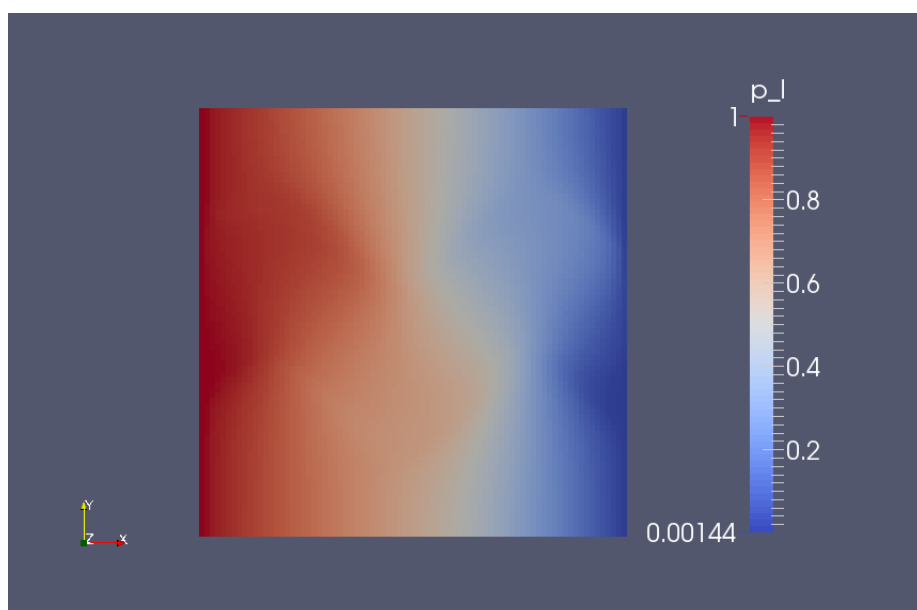
Mreža i vremenski korak

Mreža domene na levelu 0 ima 10×10 kontrolnih volumena. Nakon 3 levela profinjenja dobivamo uniformnu mrežu s 80×80 kontrolnih volumena te 6561 vrhova. Koristimo 400 vremenskih koraka (timesteps) s vremenskim korakom (timestep) $\Delta t = 25$ [s].

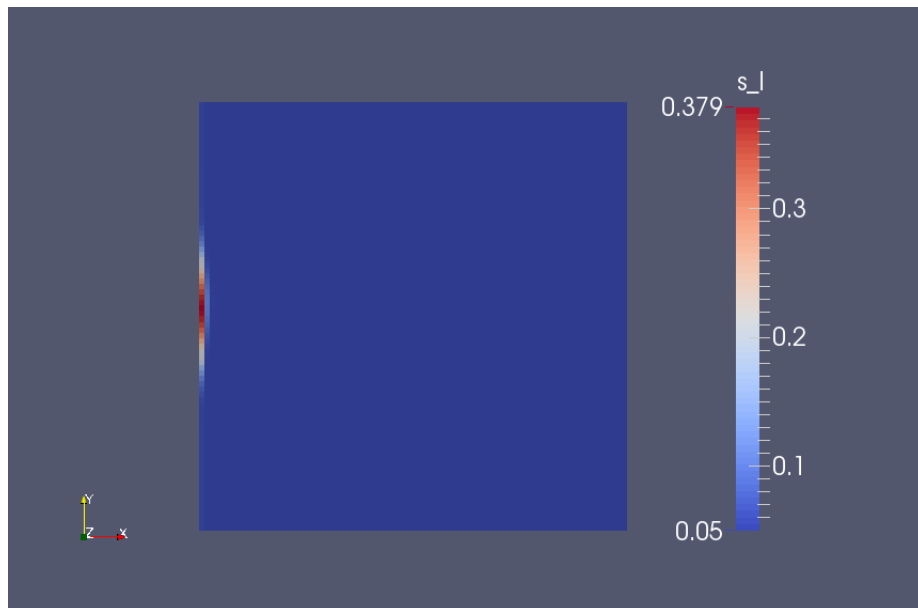
Rezultati



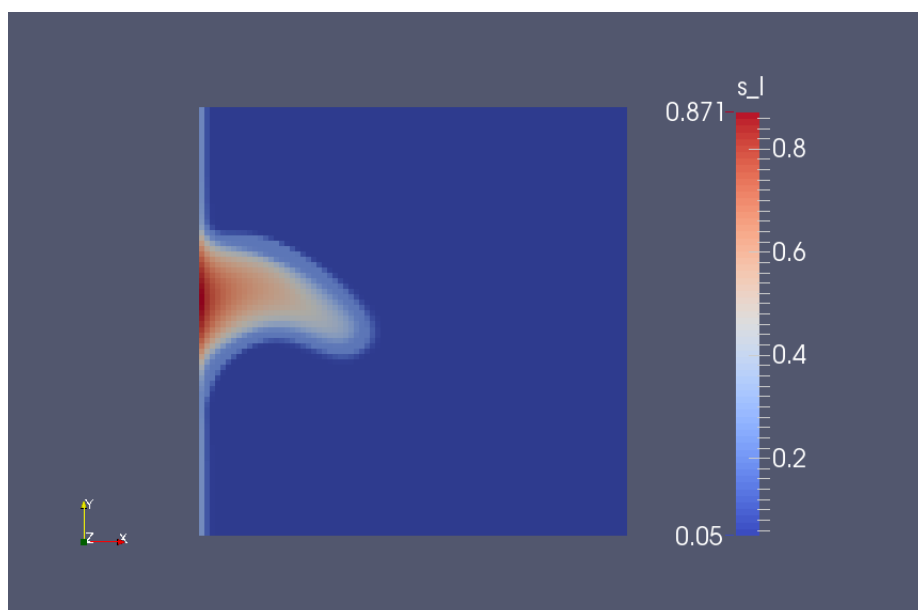
Slika 4.16: Tlak vode nakon 25 sekundi



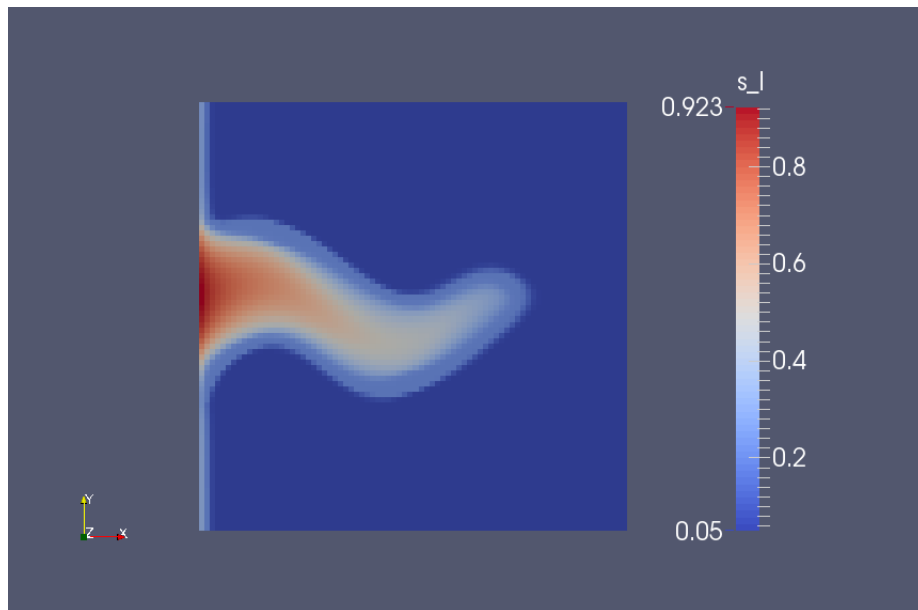
Slika 4.17: Tlak vode nakon 166 minuta i 40 sekundi



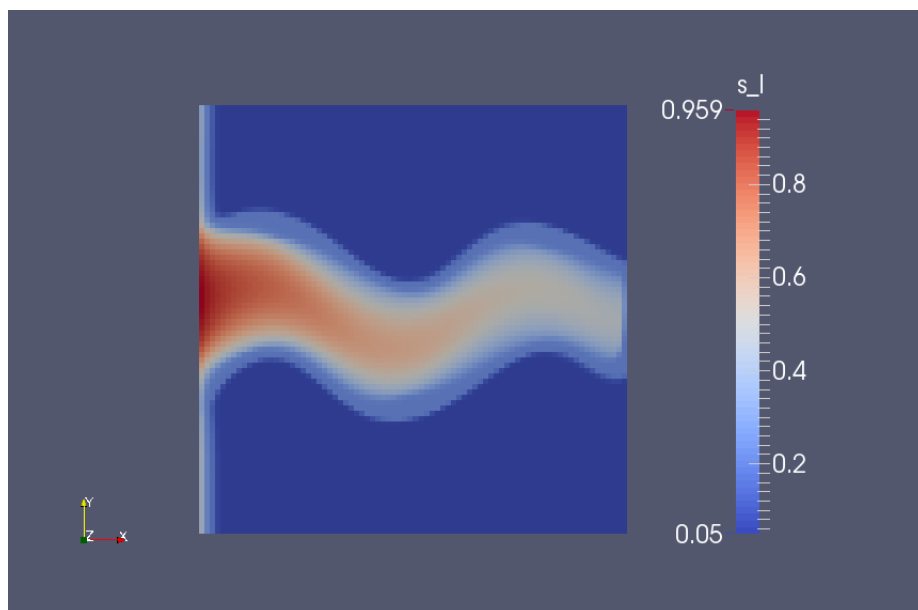
Slika 4.18: Zasićenje vodom nakon 25 sekundi



Slika 4.19: Zasićenje vodom nakon 41 minute i 40 sekundi



Slika 4.20: Zasićenje vodom nakon 83 minute i 20 sekundi



Slika 4.21: Zasićenje vodom nakon 166 minuta i 40 sekundi

Bibliografija

- [1] <http://www.dune-project.org/index.html>.
- [2] P. Bastian, *Numerical Computation of Multiphase Flows in Porous Media*, Habilitacija, Technische Fakultät der Christian-Albrechts-Universität Kiel, 1999.
- [3] Z. Chen, G. Huan i Y. Ma, *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*, SIAM, 2006.
- [4] C.C. Chueh, M. Secanell, W. Bangerth i N. Djilali, *Multi-level adaptive simulation of transient two-phase flow in heterogeneous porous media*, *Computers and Fluids* **39** (2010), 1585–1596.
- [5] R. Eymard, R. Herbin i A. Michel, *Mathematical Study of a Petroleum-Engineering Scheme*, *ESAIM: M2AN* **37** (2003), 937–972.
- [6] Randall J. LeVeque, *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhäuser Basel, 1992.
- [7] George F. Pinder i William G. Gray, *Essentials of Multiphase Flow and Transport in Porous Media*, John Wiley, 2008.

Sažetak

U ovom radu smo proučavali model dvofaznog toka kroz heterogenu poroznu sredinu u slučaju kada su fluidi izotermni i inkompresibilni.

U Poglavlju 1 opisujemo makroskopske jednačbe za model jednofaznog toka. Uvođenjem pojmova zasićenja, kapilarnog tlaka i relativnih propusnosti, model jednofaznog toka smo lako poopćili na model dvofaznog toka. Iz generaliziranog Darcyjevog zakona i iz zakona sačuvanja mase dobivamo matematičke jednačbe dvofaznog modela. Pokazujemo da je model dvofaznog toka paraboličko-eliptičkog tipa. Uvodimo formulaciju tlak-zasićenje.

U Poglavlju 3 uvodimo diskretizaciju sustava u formulaciji tlak-zasićenje. Koristimo metodu konačnih volumena s implicitnom vremenskom derivacijom i upwind metodom. Upwind metodu smo koristili za stabilizaciju numeričkog modela.

Na kraju smo napravili tri simulacijska primjera utoka jednog fluida u poroznu sredinu zasićenu drugim fluidom pomoću DUNE-a, software-a za rješavanje parcijalnih diferencijalnih jednačbi.

Summary

In this diploma thesis we studied two-phase flow model through heterogeneous porous media under assumption of isothermal and incompressible fluids .

In Chapter 1 we described macroscopic equations for a single-phase flow model. By introducing the concepts of saturation, capillary pressure and relative permeability, the single-phase flow model can be easily generalized to a two-phase flow model. Using generalized Darcy's law and fluid mass conservation, we obtained mathematical equations for two-phase model.

We showed that the two-phase flow model is of parabolic-elliptic type and introduced the pressure-saturation formulation.

In Chapter 3 we introduced the discretization of the system in pressure-saturation formulation. We used the finite volume method with implicit time derivation and upwind method. Upwind method is used to stabilize the numerical model.

In the end, we made three simulation examples of one fluid entering the porous media saturated by another fluid using DUNE, the software for solving partial differential equations.

Životopis

Manuela Koštroman, rođena je 16.1.1991. godine u Sarajevu, BiH. U Zadru je završila Osnovnu školu Bartula Kašića te Gimnaziju Franje Petrića, prirodoslovno-matematički smjer. Školovanje je nastavila u Zagrebu gdje je 2012. godine završila Preddiplomski sveučilišni studij matematike na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu. Pri istom je fakultetu upisala Diplomski sveučilišni studij Primijenjene matematike.