

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Czech Technical University in Prague
Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering

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

**Exact solutions for two-phase flow
in porous media in the general spatial
dimension**

Ing. Radek Fučík, Ph.D.

Souhrn

Tato habilitační přednáška pojednává o problematice přesného řešení dvoufázového proudění v porézním prostředí v obecné prostorové dimenzi. Matematické modelování proudění v porézním prostředí nachází uplatnění v řadě průmyslových (např. těžba ropy), medicínských (např. perfuze tkání), armádních (např. detekce min) nebo ekologických aplikacích (např. sekvestrace CO₂ nebo ochrana podzemní vody). V důsledku kapilárních jevů na mikroskopické úrovni porézního prostředí jsou makroskopické řídicí rovnice dvoufázového proudění v porézním prostředí nelineární vzhledem k primárním neznámým a ve většině případů je možné je řešit pouze pomocí numerických metod (např. metody sítí, konečných objemů nebo konečných prvků), které diskretizují časoprostor a vedou na řešení systému algebraických rovnic pro neznámé hodnoty aproximující primární veličiny. Výsledné numerické řešení je však zatíženo chybami způsobenými mimo jiné prostorovou a časovou diskretizací nebo konečnou aritmetikou počítače při řešení systémů algebraických rovnic. V tomto smyslu proto vzniká potřeba kvantifikovat chybu numerického řešení, případně stanovit řád konvergence dané numerické metody, k čemuž se hodí znalost přesného (analytického nebo semi-analytického) řešení, pokud takové lze najít pro vhodně formulovanou úlohu dvoufázového proudění.

Cílem této přednášky je představit přesné, semi-analytické řešení dvoufázového proudění v porézním prostředí, jež lze odvodit v obecné prostorové dimenzi pro případ bodového vtlačení jedné z fází za předpokladu nestlačitelnosti a nulové gravitace. Pro dimenzi 1 a 2 bylo toto řešení publikováno McWhorterem a Sunadou v roce 1990 a autorem této přednášky potom vylepšeno v roce 2007. V roce 2016 se autorovi podařilo toto řešení nalézt i pro dimenzi 3 a výše. V přednášce jsou nejprve stručně definovány pojmy matematického modelování dvoufázového proudění v porézním prostředí, potom shrnuta formulace úlohy v obecné dimenzi a nakonec představen způsob převodu systému řídicích rovnic na jednu obyčejnou diferenciální rovnici. V závislosti na dimenzi je pak tato rovnice převedena na jednotlivé integrální rovnice, které jsou poté řešeny iteračně pomocí numerického výpočtu integrálů. Zároveň jsou ukázány příklady těchto řešení a zmíněna autorova webová implementace pro získání těchto přesných řešení.

Summary

This habilitation lecture deals with exact solutions of two-phase flow in porous media in the general spatial dimension. Mathematical modeling of flow in porous environments is used in a number of industrial (e.g. oil extraction), medical (e.g. tissue perfusion), military (e.g. mine detection) or ecological applications (e.g. CO₂ sequestration or groundwater protection). Due to capillary phenomena at the microscopic level of the porous medium, the macroscopic governing equations of two-phase flow in a porous medium are nonlinear with respect to primary unknowns and, in most cases, can only be solved using numerical methods (e.g. finite difference, finite volume or finite element methods) that discretize space-time and lead to the solution of a system of algebraic equations for unknown values approximating primary quantities. However, the resulting numerical solution is burdened by errors caused, among other things, by spatial and temporal discretization or finite computer arithmetic in solving systems of algebraic equations. In this sense, there is a need to quantify the error of the numerical solution or to determine the order of convergence of the numerical method. For this task, an exact (analytical or semi-analytical) solution is employed if such can be found for a suitably formulated two-phase flow problem.

This lecture presents an exact, semi-analytical solution of two-phase flow in a porous medium, which can be derived in the general spatial dimension for a point source of one of the phases under the assumption of incompressibility and zero gravity. For dimensions 1 and 2, this solution was published by McWhorter and Sunada in 1990 and then improved by the author of this lecture in 2007. In 2016, the author managed to obtain this solution for dimensions three and above. The lecture first briefly defines the concepts of mathematical modeling of two-phase flow in a porous medium, then summarizes the formulation of the problem in the general dimension, and finally describes the transformation of the system of governing equations into a single ordinary differential equation. Depending on the dimension, this equation is then transformed into individual integral equations, which are then solved iteratively using numerical integration. Additionally, examples of these solutions are shown and the author's web applications for obtaining these exact solutions are mentioned.

Klíčová slova

proudění v porézním prostředí

dvoufázové proudění

kapilarita

semi-analytická řešení

integrální řešení

obyčejná diferenciální rovnice

Keywords

flow in porous medium

two-phase flow

capillarity

semi-analytical solutions

integral solutions

ordinary differential equation

Obsah

1	Úvod	1
2	Matematické modelování dvoufázového proudění v porézním prostředí	2
2.1	Porézní prostředí	2
2.2	Porozita	4
2.3	Fáze	4
2.4	Saturace	4
2.5	Řídící rovnice proudění	5
3	Formulace úlohy v obecné prostorové dimenzi	6
3.1	Formulace v kartézských souřadnicích	7
3.2	Formulace ve sférických souřadnicích	7
3.3	Počáteční a okrajové podmínky	8
4	Transformace na obyčejnou diferenciální rovnici	9
4.1	Substituce	9
4.2	Okrajové podmínky	9
5	Řešení integrální rovnice	10
5.1	Integrální řešení ODR	10
5.2	Řešení pro $d = 1$	10
5.3	Řešení pro $d = 2$	12
5.4	Řešení pro $d \geq 3$	14
6	Shrnutí a závěr	15
	Literatura	18
	Curriculum vitae	18

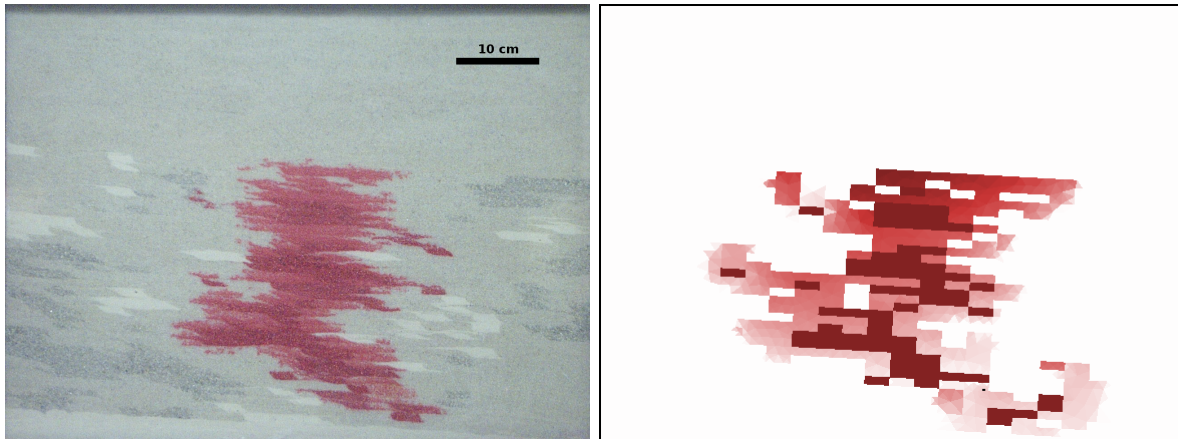
1 Úvod

Matematické modelování proudění v porézním prostředí je zajímavá část aplikované matematiky, která nachází uplatnění v řadě odvětví lidské činnosti, například při těžbě ropy nebo zemního plynu, v automobilovém průmyslu při vývoji elektrochemických článků, v medicíně při vyšetření perfuze tkání, v ekologii v problematice ochrany zdrojů podzemní vody, apod. [1, 2, 3, 4, 5, 6]. Tato přednáška se zabývá prouděním dvou nemísivých a nestlačitelných tekutin (fází) v porézním prostředí. Dvoufázové filtrační proudění takových tekutin zásadně ovlivňuje porézní struktura, velikost a propojenost pórů a zejména pak kapilární jevy, které jsou způsobené povrchovým napětím na rozhraní tekutin a pevného skeletu. Sestavení fyzikálního a matematického popisu takového proudění je netriviální úkol, který je zajímavý především z hlediska propojení jevů odehrávajících se na mikroskopické a makroskopické škále, neboť celkové makroskopické chování systému určují třecí síly, povrchová napětí a struktura prostředí na pórové úrovni.

V důsledku výše popsaných jevů jsou makroskopické řídicí rovnice dvoufázového proudění v porézním prostředí nelineární vzhledem k primárním neznámým a ve většině případů je možné je řešit pouze pomocí numerických počítačových metod (např. metody sítí, konečných objemů nebo konečných prvků), které diskretizují časoprostor a vedou na řešení systému algebraických rovnic pro neznámé hodnoty aproximující primární veličiny. Výsledné numerické řešení je pak možné porovnat (validovat) s experimentálními měřeními, jak je ilustrováno na Obrázku 1, kde je porovnáno numerické řešení s fotografií experimentu úniku obarveného oleje do vodou nasyceného heterogenního prostředí. Na první pohled simulace dokáže správně zachytit prostorové rozložení oleje, ovšem detailní pohled odhalí několik rozdílů. Ty mohou být způsobeny nepřesnostmi v přípravě laboratorního experimentu a/nebo důsledkem aproximací numerického modelu. Numerická řešení jsou totiž obecně zatížena chybami způsobenými mimo jiné prostorovou a časovou diskretizací nebo konečnou aritmetikou počítače při řešení systémů algebraických rovnic. Vzniká proto potřeba kvantifikovat chybu numerického řešení, případně stanovit řád konvergence dané numerické metody, k čemuž se hodí znalost přesného (analytického nebo semi-analytického) řešení, pokud takové lze najít pro vhodně formulovanou úlohu dvoufázového proudění.

Cílem této přednášky je představit přesné, semi-analytické řešení dvoufázového proudění v porézním prostředí, jež lze odvodit v obecné prostorové dimenzi pro případ bodového vtlačení jedné z fází za předpokladu nestlačitelnosti a nulové gravitace. Pro dimenzi 1 a 2 bylo toto řešení publikováno McWhorterem a Sunadou v roce 1990 [7] a autorem této přednášky potom vylepšeno v roce 2007 [8]. V roce 2016 se autorovi podařilo toto řešení získat i pro dimenzi 3 a výše [9]. V přednášce jsou nejprve stručně definovány pojmy matematického modelování dvoufázového proudění v porézním prostředí, potom shrnuta formulace úlohy v obecné dimenzi a nakonec představen způsob převodu systému řídicích rovnic na jednu obyčejnou diferenciální rovnici. V závislosti na dimenzi je pak tato rovnice převedena na jednotlivé integrální rovnice, které jsou poté řešeny iteračně

pomocí numerického výpočtu integrálů. Zároveň jsou ukázány příklady těchto řešení a zmíněna autorova webová implementace pro získání těchto přesných řešení.



Obrázek 1: Ukázka výsledku laboratorního experimentu (vlevo) porovnaný s výsledkem autorovy simulace pomocí numerického modelu (vpravo) založeném na smíšené hybridní metodě konečných prvků [10]. Jedná se o laboratorní experiment (CESEP, Colorado School of Mines, Golden, USA) zkoumající dynamiku úniku oleje (červeně obarveného) do vodou nasyceného heterogenního prostředí.

2 Matematické modelování dvoufázového proudění v porézním prostředí

V této kapitole jsou shrnuty základy matematicko-fyzikálního popisu dvoufázového proudění v porézním prostředí, které vychází především z [1, 3, 11, 12]. Nechť porézní prostředí vyplňuje oblast $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, kde $d \in \mathbb{N}$ značí dimenzi prostoru.

2.1 Porézní prostředí

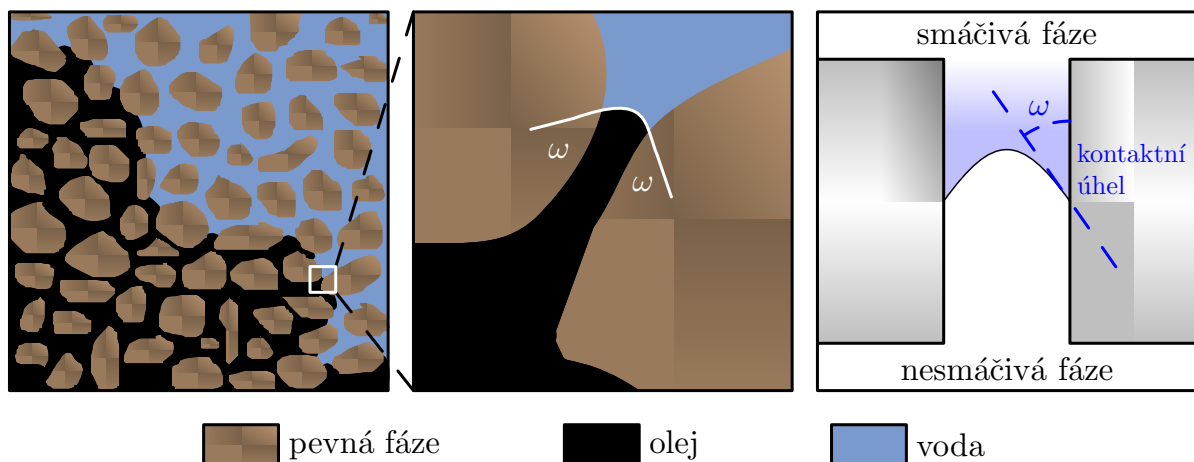
Porézním prostředím lze chápat materiál složený z pevné fáze a volného, vzájemně propojeného prostoru (póry). V nejobecnějším smyslu lze téměř každý materiál považovat za porézní, pokud uvnitř obsahuje prázdný prostor. Velikost (měřítko) a morfologie je klíčem k pochopení procesů v porézním prostředí. Proto jsou na geometrii a rozměry porézního média kladeny následující předpoklady [3]:

- A. Pórový prostor je propojen (jinak by nemohla tekutina proudit).
- B. Rozměry prázdného prostoru musí být dostatečně velké ve srovnání s rozměry

molekul tekutiny, přičemž pevná fáze může být považována za hypotetické kontinuum.

- C. Rozměry prostoru pórů musí být dostatečně malé, aby tok tekutiny byl řízen adhezivními silami na rozhraní kapaliny a pevné látky a soudržnými silami na rozhraní dvou kapalin ve vícefázových systémech.

Při modelování toku v porézním prostředí je důležité brát v úvahu různá měřítka. Obrázek 2 schematicky zobrazuje detail porézního prostředí od makroskopické po mikroskopickou škálu.



Obrázek 2: Ilustrace různých měřítek v porézním médiu (první dva obrázky zleva) a reprezentace kontaktního úhlu na rozhraní tekutin a pevné fáze.

Rovnice dynamiky tekutin musí být doplněny okrajovými a počátečními podmínkami. Ovšem kvůli složité a komplexní geometrii porézního prostředí nelze okrajové podmínky na rozhraní pevné fáze a volného prostředí v mikroskopickém měřítku předepsat. Za účelem vývoje matematického modelu se proto používá koncepce porézního média jako kontinua v makroskopickém měřítku.

V každém bodě kontinua v makroskopickém popisu je uvažována střední hodnota veličin přes reprezentativní elementární objem (REV). Bear a Verruijt [1] definují REV jako objem, který je dostatečně velký na to, aby statisticky odhadl všechny relevantní parametry konfigurace prázdného prostoru, a zároveň dostatečně malý, aby ho šlo považovat za zanedbatelnou část celkového objemu z makroskopického pohledu. Pokud takový REV nelze najít, nelze dané prostředí považovat za kontinuum.

2.2 Porozita

Pomocí zvoleného REV se definuje porozita $\phi [-]$ jako poměr objemu volného prostoru porézního prostředí k celému objemu REV:

$$\phi(\vec{x}_0) = \frac{1}{|\text{REV}|} \int_{\text{REV}} \gamma(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (1)$$

kde $\vec{x}_0 \in \text{REV} \subset \Omega$, $|\text{REV}|$ je objem REV a γ označuje charakteristickou funkci volného prostoru uvnitř porézního prostředí, která je pro každé $\vec{x} \in \text{REV}$ zavedená jako

$$\gamma(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{pokud } \vec{x} \text{ náleží volnému prostoru,} \\ 0 & \text{pokud } \vec{x} \text{ náleží pevné fázi.} \end{cases} \quad (2)$$

2.3 Fáze

Fáze je chemicky homogenní část systému, která je od ostatních takových částí oddělena určitou fyzickou hranicí a je charakterizovaná dynamickou viskozitou μ [Pa s], objemovou hmotnostní hustotou ρ [kg m⁻³], případně dalšími veličinami. Nutnost určité fyzické hranice mezi dvěma nebo více fázemi znamená, že ve vícefázovém systému nemůže být přítomna více než jedna plynná fáze, protože plyny jsou vždy plně mísitelné.

Ve většině případů je v porézních prostředích předmětem zkoumání proudění vody a dalších fází, jako je olej, chlorované uhlovodíky, CO₂ nebo vzduch. Obecně se pro kapaliny nemísitelné s vodou používá zkratka NAPL (z angl. Non-Aqueous Phase Liquid). Tyto kapaliny jsou dále děleny na husté (DNAPL), resp. lehké (LNAPL) s vyšší, resp. nižší hustotou než voda.

Podle kontaktního úhlu rozhraní mezi tekutými fázemi u pevné stěny (viz ω na Obrázku 2) rozlišujeme smáčivou (přísluší k ostrému úhlu) a nesmáčivou (přísluší k tupému úhlu) fázi. Tato práce se mimo jiné zabývá dynamikou dvou nemísivých tekutin voda-NAPL, přičemž voda je vždy smáčivá a označována indexem w (z angl. wetting). Druhá, nesmáčivá fáze je pak značena indexem n (z angl. non-wetting). Systémy se dvěma tekutými fázemi se nazývají dvoufázové, tj. pevná fáze, která je v porézním prostředí vždy přítomna, se do označení nezahrnuje.

2.4 Saturace

V mikroskopickém měřítku náleží každý bod REV buď pevné, nebo právě jedné tekuté fázi $\alpha \in \{w, n\}$. Pomocí charakteristické funkce γ_α tekuté fáze α , definované v čase t pro každý bod $\vec{x} \in \Omega$ vztahem

$$\gamma_\alpha(t, \vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{pokud } \vec{x} \text{ náleží fázi } \alpha \text{ v čase } t, \\ 0 & \text{jinak,} \end{cases} \quad (3)$$

lze zavést saturaci $S_\alpha [-]$ fáze α :

$$S_\alpha(t, \vec{x}_0) = \frac{\int_{\text{REV}} \gamma_\alpha(t, \vec{x}) d\vec{x}}{\int_{\text{REV}} \gamma(t, \vec{x}) d\vec{x}}, \quad (4)$$

kde $\vec{x}_0 \in \text{REV} \subset \Omega$.

Z definice (4) plyne, že saturace fáze α je bezrozměrná veličina s hodnotami mezi 0 a 1, přičemž v případě uvažovaného dvoufázového systému platí

$$S_w + S_n = 1. \quad (5)$$

Je dobře známo, že jednotlivé fáze nelze zcela mechanicky vytlačit z porézního prostředí, např. [13, 14]. Proto se pro každou fázi $\alpha \in \{w, n\}$ zavádí reziduální (zbytková) saturace $S_{r,\alpha}$ vyjadřující takové minimální nasycení, které se v porézním médiu udrží vlivem adheze vůči pevné matici.

K popisu zbylé, mechanicky vytlačitelné části dané fáze α se používá efektivní saturace $S_{e,\alpha} [-]$:

$$S_{e,\alpha} = \frac{S_\alpha - S_{r,\alpha}}{1 - \sum_{\beta} S_{r,\beta}}, \quad (6)$$

která, stejně jako saturace S_α , nabývá hodnot mezi 0 a 1, a pro níž platí

$$S_{e,w} + S_{e,n} = 1. \quad (7)$$

2.5 Řídící rovnice proudění

Dynamiku fáze α řídí zákon zachování hmoty ve tvaru [1, 3, 11]

$$\frac{\partial(\phi \varrho_\alpha S_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_\alpha \vec{v}_\alpha) = \varrho_\alpha F_\alpha, \quad (8)$$

kde filtrační rychlost \vec{v}_α je dána Darcyho zákonem

$$\vec{v}_\alpha = -\lambda_\alpha \mathbf{K}(\nabla p_\alpha - \varrho_\alpha \vec{g}), \quad (9)$$

kde \vec{g} [m s⁻²] je vektor gravitačního zrychlení, \mathbf{K} [m²] je tenzor vnitřní propustnosti porézního prostředí, p_α [Pa] je tlak, λ_α [Pa⁻¹s⁻¹] je mobilita a F_α [kg m⁻³s⁻¹] je zdrojový člen fáze α .

Darcyho zákon je důsledkem zákona zachování hybnosti, přičemž v případě dvoufázového (a obecně vícefázového) proudění se v porézním prostředí zanedbává výměna hybnosti mezi fázemi.

Mobilita fáze α označuje

$$\lambda_\alpha = \frac{k_{r,\alpha}}{\mu_\alpha}, \quad (10)$$

kde $k_{r,\alpha}$ je relativní propustnost fáze α , která vyjadřuje snížení hydraulické propustnosti porézního prostředí v důsledku přítomnosti fáze α a nabývá hodnot mezi 0 a 1.

Kapilární jevy na pórové, mikroskopické úrovni způsobí skok mezi fázovými tlaky na makroskopické úrovni. Tento skok se nazývá kapilární tlak, značí se p_c [Pa] a je definován vztahem

$$p_c = p_n - p_w. \quad (11)$$

V případě dvoufázového proudění se dá experimentálně změřit závislost $p_c = p_c(S_{e,w})$ pro $S_{e,w} \in (0, 1)$, přičemž z matematického pohledu lze o této závislosti předpokládat, že p_c je ostře klesající a spojitě diferencovatelná na $(0, 1)$ a $\lim_{S_{e,w} \rightarrow 1^-} p_c(S_{e,w}) \geq 0$, [15].

3 Formulace úlohy v obecné prostorové dimenzi

Za předpokladu nestlačitelného dvoufázového proudění v rigidním, homogenním a izotropním porézním prostředí bez zdrojů a gravitace lze v obecném prostoru \mathbb{R}^d , $d \in \mathbb{N}$, formulovat úlohu tak, že pro ni existuje přesné, semi-analytické řešení. Tato úloha se nazývá McWhorterova a Sunadova úloha [7, 16, 8, 17, 9].

Úloha představuje situaci, kdy je jedna z fází vtlačena v počátku souřadné soustavy do oblasti vyplněné druhou fází (s jistou saturací), přičemž se předpokládá, že výsledný profil saturace bude symetrický okolo bodu vtlačení umístěného v počátku soustavy souřadnic. V této přednášce budeme pro jednoduchost uvažovat pouze případ vtlačení smáčivé fáze (se saturací $S_w = S_0$) do oblasti naplněné fází nesmáčivou (se saturací $S_w = S_i < S_0$). Odvození přesného řešení pro opačnou situaci je analogické [7, 8].

Principem odvození přesného řešení je transformace parciální diferenciální rovnice dvoufázového proudění na obyčejnou diferenciální rovnici (ODR), která je následně převedena na rovnici integrální. Pro řešení integrální rovnice je pak použita numerická iterační metoda, proto se výsledné řešení nazývá semi-analytické.

Za výše uvedených předpokladů se rovnice kontinuity (8) pro fázi $\alpha \in \{w, n\}$ zjednoduší na

$$\phi \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v}_\alpha = 0, \quad (12a)$$

kde Darcyho rychlost fáze α je dána vztahem

$$\vec{v}_\alpha = -\lambda_\alpha K \nabla p_\alpha, \quad (12b)$$

kde K [m²] označuje izotropní (skalární) vnitřní propustnost porézního prostředí.

3.1 Formulace v kartézských souřadnicích

Zavedením celkové rychlosti $\vec{v}_T = \vec{v}_w + \vec{v}_n$ a použitím definice kapilárního tlaku (11) lze rovnice (12b) pro $\alpha = w$ a $\alpha = n$ zkombinovat a vyjádřit tak Darcyho rychlost smáčivé fáze ve tvaru

$$\vec{v}_w = f(S_w)\vec{v}_T - D(S_w)\nabla S_w, \quad (13)$$

kde $f[-]$ je frakční funkce smáčivé fáze

$$f(S_w) = \frac{\lambda_w(S_w)}{\lambda_w(S_w) + \lambda_n(S_w)} \quad (14)$$

a $D [\text{m}^2\text{s}^{-1}]$ je funkce zahrnující jevy kapilární difuze

$$D(S_w) = -K \frac{\lambda_w(S_w)\lambda_n(S_w)}{\lambda_w(S_w) + \lambda_n(S_w)} \frac{dp_c}{dS_w}(S_w). \quad (15)$$

Rovnice kontinuity (12a) pro obě fáze lze s využitím zavedeného značení přeformulovat na soustavu rovnic

$$\nabla \cdot \vec{v}_T = 0, \quad (16a)$$

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot (f(S_w)\vec{v}_T - D(S_w)\nabla S_w) = 0, \quad (16b)$$

pro neznámé funkce $S_w = S_w(t, \vec{x})$ a $\vec{v}_T = \vec{v}_T(t, \vec{x})$, $\forall t > 0$, $\forall \vec{x} \in \mathbb{R}^d$.

3.2 Formulace ve sférických souřadnicích

Předpoklad symetrie hledaného přesného řešení vzhledem k počátku umožňuje převést soustavu rovnic (16) z kartézských souřadnic do sférických souřadnic v \mathbb{R}^d , tj. předpokládají se funkční závislosti $\vec{v}_T = \vec{v}_T(t, r)$ a $S_w = S_w(t, r)$, kde r [m] označuje (nezápornou) radiální souřadnici.

Rovnici (16a) splňuje

$$\vec{v}_T(t, r) = \frac{Q_0(t)}{\gamma_d r^{d-1}} \vec{e}_r, \quad (17)$$

kde $Q_0 [\text{m}^d\text{s}^{-1}]$ je obecně časově závislý objemový tok a \vec{e}_r je jednotkový vektor v kladné směru radiální souřadnice. V rovnici (17) ještě vystupuje $\gamma_d [\text{m}^{d-1}]$, což je povrch jednotkové koule v \mathbb{R}^d daný vztahem

$$\gamma_d = \frac{d\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)}, \quad (18)$$

kde Γ označuje gama funkci.

Zavedením bezrozměrné funkce $F = F(t, r)$ vztahem

$$F = F_w - \frac{\gamma_d r^{d-1}}{(1 - f(S_i))Q_0} D \frac{\partial S_w}{\partial r}, \quad (19)$$

kde $F_w [-]$ označuje normalizovanou frakční funkci smáčivé fáze

$$F_w(S_w) = \frac{f(S_w) - f(S_i)}{1 - f(S_i)}, \quad (20)$$

lze rovnici (16b) pro všechna $r > 0$ a $t > 0$ převést do tvaru

$$\gamma_d r^{d-1} \phi \frac{\partial S_w(t, r)}{\partial t} + (1 - f(S_i))Q_0(t) \frac{\partial F(t, r)}{\partial r} = 0. \quad (21)$$

3.3 Počáteční a okrajové podmínky

Rovnice (21) je doplněna následujícími počátečními a okrajovými podmínkami pro funkci $S_w = S_w(t, r)$

$$S_w(0, r) = S_i, \quad \forall r > 0, \quad (22a)$$

$$S_w(t, 0) = S_0, \quad \forall t > 0, \quad (22b)$$

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} S_w(t, r) = S_i, \quad \forall t > 0, \quad (22c)$$

kteřé pro $S_0 > S_i$ vyjadřují bodové vtlačení smáčivé fáze v počátku souřadného systému.

V [9] je podrobně popsáno, že funkce $F = F(t, r)$ splňuje okrajové podmínky

$$F(t, 0) = 1, \quad \forall t > 0, \quad (23a)$$

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} F(t, r) = 0, \quad \forall t > 0. \quad (23b)$$

První podmínka (23a) souvisí s rovností celkového toku a toku smáčivé fáze v počátku souřadného systému. Podmínka (23b) platí při splnění dodatečného předpokladu

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} r^{d-1} \frac{\partial S_w}{\partial r}(t, r) = 0, \quad \forall t > 0. \quad (24)$$

4 Transformace na obyčejnou diferenciální rovnici

4.1 Substitute

Pokud vstupní tok Q_0 splňuje časovou závislost

$$Q_0(t) = At^{\frac{d-2}{2}}, \quad (25)$$

kde A [$\text{m}^d \text{s}^{-\frac{d}{2}}$] je konstanta, lze ukázat, že F je funkcí pouze saturace, tj. $F = F(S_w)$, [9] a pomocí podobnostní substitute

$$S_w(t, r) = S_w(\lambda), \quad (26)$$

kde

$$\lambda = rt^{-\frac{1}{2}}, \quad (27)$$

lze redukovat parciální diferenciální rovnici (21) na ODR druhého řádu pro neznámou funkci $F = F(S_w)$. Tato rovnice je ve tvaru

$$F''(S_w) [F'(S_w)]^{\frac{2}{d}-2} = -A^{-\frac{2}{d}} \frac{C_d D(S_w)}{F(S_w) - F_w(S_w)}, \quad \forall S_w \in [S_i, S_0], \quad (28)$$

kde

$$C_d = d \left(\frac{\gamma_d}{1 - f(S_i)} \right)^{\frac{2}{d}} \left(\frac{\phi}{2} \right)^{\frac{2}{d}-1}, \quad (29)$$

přičemž výsledné řešení $S_w = S_w(t, r)$ se pro všechna $t > 0$ a $r > 0$ získá z implicitní rovnice

$$r^d t^{-\frac{d}{2}} = \frac{2A(1 - f(S_i))}{\gamma_d \phi} F'(S_w(t, r)). \quad (30)$$

4.2 Okrajové podmínky

V důsledku transformačního vztahu (27) plynou z počáteční a okrajových podmínek (22) a (23) následující okrajové podmínky pro F

$$\lim_{S_w \rightarrow S_i^+} F(S_w) = 0, \quad (31a)$$

$$F(S_0) = 1. \quad (31b)$$

Navíc platí následující okrajové podmínky i pro F' :

$$F'(S_i^+) := \lim_{S_w \rightarrow S_i^+} F'(S_w) = \lambda_*^d \frac{\gamma_d \phi}{2A(1 - f(S_i))}, \quad (32a)$$

$$F'(S_0) = 0, \quad (32b)$$

kde λ_* označuje limitu inverzního vztahu $\lambda = \lambda(S_w)$

$$\lim_{S_w \rightarrow S_i^+} \lambda(S_w) = \lambda_* \quad (33)$$

o které lze dokázat, že je konečná, viz [9].

Přestože by se mohlo zdát, že úloha (28) má o dvě okrajové podmínky více, než je pro ODR druhého řádu přípustné z hlediska existence řešení, není tomu tak. Vztah (32a) nelze považovat za okrajovou podmínku, protože pouze přiřazuje význam neznámé hodnoty λ_* k limitní hodnotě $F'(S_i^+)$. Druhá podmínka (32b) má přímý dopad na možnost volby buď parametru A , nebo vstupní saturace S_0 v závislosti na d , jak bude ukázáno v další části.

V případě $d = 1$ lze $F'(S_0) = 0$ zajistit jen tehdy, když

$$A = -\frac{\gamma_d}{1 - f(S_i)} \frac{D(S_0)}{1 - F_w(S_0)} \frac{1}{\lambda'(S_0)}, \quad (34)$$

viz [9, 7].

5 Řešení integrální rovnice

5.1 Integrální řešení ODR

V původních člancích McWhortera a Sunady [7, 16] byl pro $d = 1$ a $d = 2$ navržen způsob řešení rovnice (28) pomocí jejího převodu na integrální rovnici, která je posléze řešena iteračně a pomocí numerické aproximace integrálů. V článku [9] byl autorem navržen způsob získání řešení (28) i pro $d \geq 3$. Všechny výsledné integrální rovnice a iterační schémata k jejich řešení jsou shrnuty v následujících sekcích. Integrální rovnice, ekvivalentní rovnici (28), se odvodí z (28) dvojnásobnou postupnou integrací a použitím okrajových podmínek (31) a (32b).

5.2 Řešení pro $d = 1$

Věta 5.1. *Pro $d = 1$ je řešení úlohy (28) s okrajovými podmínkami (31) a při splnění podmínky (32b) ekvivalentní řešení integrální rovnice*

$$F(S_w) = 1 - \frac{\int_{S_w}^{S_0} \frac{(\beta - S_w)D(\beta)}{F(\beta) - F_w(\beta)} d\beta}{\int_{S_i}^{S_0} \frac{(\beta - S_i)D(\beta)}{F(\beta) - F_w(\beta)} d\beta}, \quad (35)$$

pokud platí vztah mezi A a S_0 ve tvaru

$$A^2 = C_1 \int_{S_i}^{S_0} \frac{(\beta - S_i)D(\beta)}{F(\beta) - F_w(\beta)} d\beta. \quad (36)$$

Důkaz. Integrací (28) od S_w do S_0 a použitím podmínky (32b) vznikne vztah pro F' ve tvaru

$$F'(S_w) = A^{-2} C_1 \int_{S_w}^{S_0} \frac{D(\beta)}{F(\beta) - F_w(\beta)} d\beta, \quad \forall S_w \in (S_i, S_0). \quad (37a)$$

Další integrací (37) od S_w do S_0 a použitím podmínky (31b) vznikne

$$1 - F(S_w) = A^{-2} C_1 \int_{S_w}^{S_0} \int_{\eta}^{S_0} \frac{D(\beta)}{F(\beta) - F_w(\beta)} d\beta d\eta, \quad \forall S_w \in (S_i, S_0). \quad (37b)$$

Integrál na pravé straně (37b) se pomocí integrace per partes převede na [7]

$$1 - F(S_w) = A^{-2} C_1 \int_{S_w}^{S_0} \frac{(\beta - S_w)D(\beta)}{F(\beta) - F_w(\beta)} d\beta, \quad \forall S_w \in (S_i, S_0). \quad (37c)$$

Limitním přechodem $S_w \rightarrow S_i^+$ v (37c) a použitím podmínky (31a) dostaneme požadovaný vztah mezi A a S_0 daný rovnicí (36).

Posledním krokem je dosazení vztahu (36) pro A^2 do (37c), čímž vznikne (35). \square

Derivace rovnice (35) podle S_w umožní explicitně vyjádřit F' :

$$F'(S_w) = \frac{\int_{S_w}^{S_0} \frac{D(\beta)}{F(\beta) - F_w(\beta)} d\beta}{\int_{S_i}^{S_0} \frac{(\beta - S_i)D(\beta)}{F(\beta) - F_w(\beta)} d\beta}, \quad \forall S_w \in (S_i, S_0). \quad (38)$$

Integrální rovnici (35) lze vyřešit iteračně pomocí numerické integrace ve tvaru navrženém v [7]:

$$F_{k+1}(S_w) = 1 - \frac{\int_{S_w}^{S_0} \frac{(\beta - S_w)D(\beta)}{F_k(\beta) - F_w(\beta)} d\beta}{\int_{S_i}^{S_0} \frac{(\beta - S_i)D(\beta)}{F_k(\beta) - F_w(\beta)} d\beta}, \quad (39)$$

kde F_k značí k -tou iteraci F , přičemž $F_0 \equiv 1$ je doporučená počáteční hodnota. Iterační schéma (39) je konvergentní, pouze pokud je vstupní saturace S_0 dostatečně daleko od

maximální smáčivé saturace $S_w^{max} := 1 - S_{n,r}$ [8, 9, 7, 16]. Pokud $S_0 \rightarrow S_w^{max}$, pak dochází v původně navrženém iteračním schématu k významnému nárůstu iterací, až k divergenci.

V článku [8] byly autorem této práce navrženy dvě různé modifikace iteračního schématu (varianty A a B), které umožňují získat řešení pro podstatně vyšší hodnoty S_0 . Obě varianty modifikované iterační metody jsou založené na substituci

$$G(S_w) = \frac{D(S_w)}{F(S_w) - F_w(S_w)}, \quad (40)$$

přičemž varianty A, resp. B jsou ve tvaru

$$G_{k+1}(S_w) = D(S_w) + G_k(S_w) \left(F_w(S_w) + \frac{S_w}{S_0} \frac{\int_{S_i}^{S_0} (\beta - S_w) G_k(\beta) d\beta}{\int_{S_i}^{S_0} (\beta - S_i) G_k(\beta) d\beta} \right), \quad (41)$$

resp.

$$G_{k+1}(S_w) = [D(S_w) + G_k(S_w) F_w(S_w)] \left(1 - \frac{S_w}{S_0} \frac{\int_{S_i}^{S_0} (\beta - S_w) G_k(\beta) d\beta}{\int_{S_i}^{S_0} (\beta - S_i) G_k(\beta) d\beta} \right)^{-1}, \quad (42)$$

s doporučenou počáteční hodnotou $G_0 \equiv 0$ [8].

Iterační schémata jsou zastavena, pokud je velikost rozdílu po sobě jdoucích iterací menší než předem stanovená mez.

Analýzu této problematiky lze nalézt i v pozdějším článku [18], kde je rovnice (28) řešena pomocí spektrálních metod.

5.3 Řešení pro $d = 2$

Věta 5.2. *Pro $d = 2$ je řešení úlohy (28) s okrajovými podmínkami (31) a při splnění podmínky (32b) ekvivalentní řešení integrální rovnice*

$$F(S_w) = \frac{\int_{S_i}^{S_w} \exp \left(-\frac{C_2}{A} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right) d\beta}{\int_{S_i}^{S_0} \exp \left(-\frac{C_2}{A} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right) d\beta}, \quad \forall S_w \in (S_i, S_0), \quad (43)$$

pokud $S_0 = S_w^{max}$.

Důkaz. Integrací (28) od S_i do S_w vznikne

$$F'(S_w) = F'(S_i^+) \exp \left(-\frac{C_2}{A} \int_{S_i}^{S_w} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right), \quad \forall S_w \in (S_i, S_0), \quad (44a)$$

kde $F'(S_i^+) := \lim_{S_w \rightarrow S_i^+} F'(S_w)$ je zatím neznámá, ale konečná hodnota odpovídající λ_* z podmínky (32a). Podmínka (32b) je splněna jen tehdy, pokud je integrál na pravé straně rovnice (44a) nekonečný při $S_w \rightarrow S_0^-$. Vzhledem k omezenosti funkce $D = D(S_w)$ to znamená, že musí platit

$$0 = \lim_{S_w \rightarrow S_0^-} F(S_w) - F_w(S_0) = 1 - F_w(S_0), \quad (44b)$$

tj. $F_w(S_0) = 1$, což je podle definice F_w v rovnici (20) a frakční funkce f v rovnici (14) splněno právě tehdy, když $S_0 = S_w^{max}$.

Další integrací rovnice (44a) od S_i do S_w a při použití okrajové podmínky (31a) vznikne

$$F(S_w) = F'(S_i^+) \int_{S_i}^{S_w} \exp \left(-\frac{C_2}{A} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right) d\beta, \quad \forall S_w \in (S_i, S_0). \quad (44c)$$

Z rovnice (44c) je zřejmé, že k splnění poslední okrajové podmínky (31b) musí $F'(S_i^+)$ splňovat

$$F'(S_i^+) = \left[\int_{S_i}^{S_0} \exp \left(-\frac{C_2}{A} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right) d\beta \right]^{-1}, \quad (44d)$$

odkud již v kombinaci s (44c) plyne tvrzení (43). □

Derivace rovnice (43) podle S_w umožní explicitně vyjádřit F' :

$$F'(S_w) = \frac{\exp \left(-\frac{C_2}{A} \int_{S_i}^{S_w} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right)}{\int_{S_i}^{S_0} \exp \left(-\frac{C_2}{A} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right) d\beta}. \quad (45)$$

Řešení integrální rovnice (43), navržené v [7], je opět založené na iteračním schématu

a numerické aproximaci integrálů ve tvaru

$$F_{k+1}(S_w) = \frac{\int_{S_i}^{S_w} \exp\left(-\frac{C_2}{A} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F_k(\eta) - F_w(\eta)} d\eta\right) d\beta}{\int_{S_i}^{S_0} \exp\left(-\frac{C_2}{A} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F_k(\eta) - F_w(\eta)} d\eta\right) d\beta}, \quad (46)$$

přičemž $F_0 \equiv 1$ je doporučená počáteční hodnota. Iterační schéma je zastaveno, pokud je velikost rozdílu po sobě jdoucích iterací menší než předem stanovená mez.

5.4 Řešení pro $d \geq 3$

Věta 5.3. *Pokud $S_0 = S_w^{max}$, je řešení úlohy (28) pro $d \geq 3$ s okrajovými podmínkami (31) a při splnění podmínky (32b) ekvivalentní řešení integrální rovnice*

$$F(S_w) = \int_{S_i}^{S_w} \left[(F'(S_i^+))^{\frac{2-d}{d}} + \frac{d-2}{d} C_d A^{-\frac{2}{d}} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right]^{\frac{d}{2-d}} d\beta, \quad (47)$$

kde $F'(S_i^+)$ splňuje

$$1 = \int_{S_i}^{S_0} \left[(F'(S_i^+))^{\frac{2-d}{d}} + \frac{d-2}{d} C_d A^{-\frac{2}{d}} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right]^{\frac{d}{2-d}} d\beta. \quad (48)$$

Důkaz. Integrací (28) od S_i do S_w vznikne

$$F'(S_w) = \left[(F'(S_i^+))^{\frac{2-d}{d}} + \frac{d-2}{d} C_d A^{-\frac{2}{d}} \int_{S_i}^{S_w} \frac{D(\eta)}{F(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right]^{\frac{d}{2-d}}, \quad (49)$$

$\forall S_w \in (S_i, S_0)$, kde $F'(S_i^+)$ je zatím neznámá, ale konečná hodnota z podmínky (32a). Dále se postupuje analogicky jako v důkazu Věty 5.2, tj. podmínka (32b) je splněna jen tehdy, pokud je integrál na pravé straně rovnice (49) nekonečný při $S_w \rightarrow S_0^-$, odkud plyne nutnost $S_0 = S_w^{max}$.

Další integrací (49) od S_i do S_w při použití okrajové podmínky (31a) rovnou vznikne rovnice (47), přičemž je zřejmé, že poslední okrajová podmínka (31b) je splněna právě tehdy, když $F'(S_i^+)$ splňuje rovnici (48). \square

Autorem bylo v [9] navrženo nejen odvození obecné ODR (28) a ekvivalentní integrální rovnice ve Větě 5.3, ale též iterační způsob řešení této integrální rovnice (47) při splnění

požadované vazby (48) ve tvaru

$$F_{k+1}^{(B)}(S_w) = \min \left\{ \int_{S_i}^{S_w} \left[B^{\frac{2-d}{d}} + \frac{d-2}{d} C_d A^{-\frac{2}{d}} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta) d\eta}{F_k^{(B)}(\eta) - F_w(\eta)} \right]^{\frac{d}{2-d}} d\beta; 1 \right\}, \quad (50)$$

kde parametr $B \in \mathbb{R}$ zastupuje neznámou hodnotu $F'(S_i^+)$ a $F_k^{(B)}$ je k -tá iterace aproximace funkce F při dané hodnotě B . Jako počáteční hodnotu je doporučeno zvolit $F_0^{(B)} \equiv 1$ pro každé $B \in \mathbb{R}$.

Samotný algoritmus výpočtu je navržen tak, že pro dané B je iterační schéma (50) zastaveno po $k^{(B)}$ krocích, pokud je velikost rozdílu po sobě jdoucích iterací menší než předem stanovená mez.

Dále je zaveden funkcionál

$$\mathcal{H}_B(\xi) := 1 - \int_{S_i}^{S_0} \left[B^{\frac{2-d}{d}} + \frac{d-2}{d} C_d A^{-\frac{2}{d}} \int_{S_i}^{\beta} \frac{D(\eta)}{\xi(\eta) - F_w(\eta)} d\eta \right]^{\frac{d}{2-d}} d\beta, \quad (51)$$

jehož nulová hodnota pro nějaké B a $\xi \equiv F^{(B)}$ odpovídá splnění podmínky (48). Výsledná hodnota funkcionálu \mathcal{H}_B je pro dané B a $F_{k^{(B)}}^{(B)}$ označena $H(B) := \mathcal{H}_B(F_{k^{(B)}}^{(B)})$. Numerické simulace v článku [9] naznačují, že funkce $H = H(B)$ je monotonní a má právě jeden kořen B^* , který odpovídá hledané hodnotě $F'(S_i^+)$, tj. B^* splňuje rovnici

$$B^* = (F^{(B^*)})'(S_i^+). \quad (52)$$

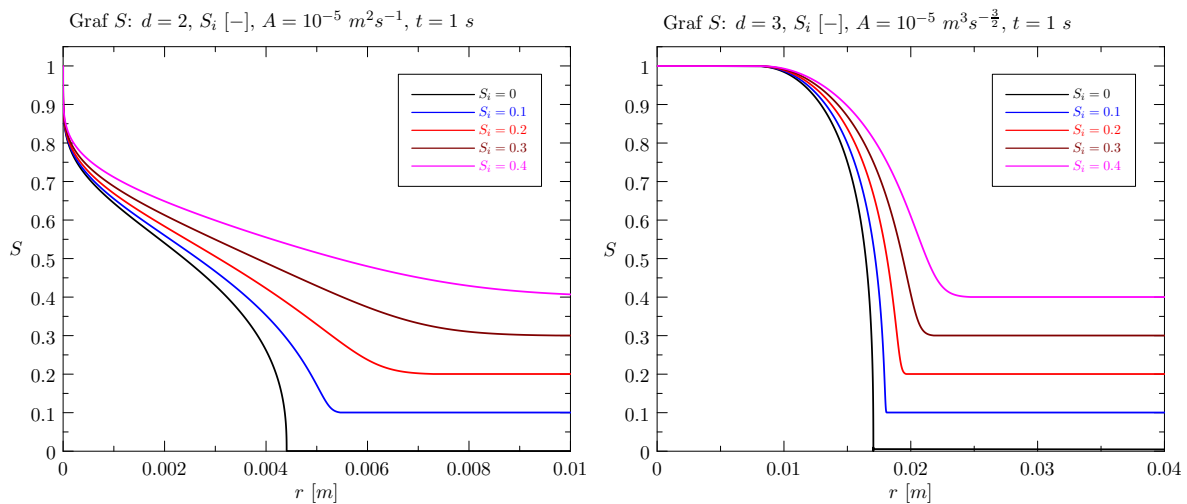
6 Shrnutí a závěr

V této přednášce bylo představeno přesné, semi-analytické řešení dvoufázového proudění v porézním prostředí v obecné prostorové dimenzi.

Pro $d = 1$ jsou numerické řešiče pro původní schéma a obě varianty modifikovaného iteračního schématu volně k dispozici v podobě webové aplikace na webové stránce autora <http://mmg.fjfi.cvut.cz/~fucik/mcwhorter>.

V článku [17] bylo navíc autorem ukázáno, že dvě jednorozměrná přesná řešení se dají použít k odvození přesného řešení pro úlohu dvoufázového proudění v porézním prostředí s materiálovou nespojitostí. Numerický řešič pro tuto úlohu autor taktéž implementoval v podobě volně dostupné webové aplikace na webové stránce <http://mmg.fjfi.cvut.cz/~fucik/exacthetero>.

Nakonec i numerická řešení iteračních schémat (46) pro $d = 2$ a (50) pro $d \geq 3$ jsou ve formě webové aplikace volně k dispozici na webové stránce autora <http://mmg.fjfi>.



Obrázek 3: Ukázka semi-analytických řešení profilů saturace pro dimenze $d = 2$ (vlevo) a $d = 3$ (vpravo) pro různé volby počáteční saturace S_i .

`cvut.cz/~fucik/exact` .

Přesná řešení byla použita k testování implementace numerických metod například v [10] a [19].

Literatura

1. BEAR, J.; VERRUIJT, A. *Modeling Groundwater Flow and Pollution*. Dordrecht: D. Reidel, Holland, 1990.
2. HELMIG, R.; HUBER, R. Comparison of Galerkin-type Discretization Techniques for Two-Phase Flow in Heterogeneous Porous Media. *Advances in Water Resources*. 1998, vol. 21, no. 8, s. 697–711.
3. BASTIAN, P. Numerical Computation of Multiphase Flows in Porous Media. *Habilitation Thesis, Kiel university*. 1999.
4. COOKSON, A. N.; LEE, J.; MICHLER, C.; CHABINIOK, R.; HYDE, E.; NORDSLETTEN, D.; SMITH, N. A spatially-distributed computational model to quantify behaviour of contrast agents in MR perfusion imaging. *Medical image analysis*. 2014, vol. 18, no. 7, s. 1200–1216.
5. SUBRAMANIAN, V. R.; DIWAKAR, V. D.; TAPRIYAL, D. Efficient macro-micro scale coupled modeling of batteries. *J. Electrochem. Soc.* 2005, vol. 152, no. 10, A2002–A2008.
6. DAO, T.-S.; VYASARAYANI, C. P.; MCPHEE, J. Simplification and order reduction of lithium-ion battery model based on porous-electrode theory. *J. Power Sources*. 2012, vol. 198, s. 329–337.

7. MCWHORTER, D. B.; SUNADA, D. K. Exact Integral Solutions for Two-Phase Flow. *Water Resources Research*. 1990, vol. 26, no. 3, s. 399–413.
8. FUČÍK, R.; MIKYŠKA, J.; BENEŠ, M.; ILLANGASEKARE, T. H. An Improved Semi-Analytical Solution for Verification of Numerical Models of Two-Phase Flow in Porous Media. *Vadose Zone Journal*. 2007, vol. 6, no. 1, s. 93–104.
9. FUČÍK, R.; ILLANGASEKARE, T. H.; BENEŠ, M. Multidimensional self-similar analytical solutions of two-phase flow in porous media. *Advances in Water Resources*. 2016, vol. 90, s. 51–56.
10. FUČÍK, R.; KLINKOVSKÝ, J.; SOLOVSKÝ, J.; OBERHUBER, T.; MIKYŠKA, J. Multidimensional mixed–hybrid finite element method for compositional two-phase flow in heterogeneous porous media and its parallel implementation on GPU. *Computer Physics Communications*. 2019, vol. 238, s. 165–180.
11. HELMIG, R. *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface: A Contribution to the Modeling of Hydrosystems*. Berlin: Springer Verlag, 1997.
12. ILLANGASEKARE, T. H.; SMITS, K. M.; FUČÍK, R.; DAVARZANI, H. From Pore to the Field: Upscaling Challenges and Opportunities in Hydrogeological and Land–Atmospheric Systems. In: *Pore Scale Phenomena: Frontiers in Energy and Environment*. World Scientific, 2015, s. 163–202.
13. HELMIG, R.; WEISS, A.; WOHLMUTH, B. I. Dynamic Capillary Effects in Heterogeneous Porous Media. *Computational Geosciences*. 2007, vol. 11, no. 3, s. 261–274.
14. BEAR, J. *Modeling phenomena of flow and transport in porous media*. Springer, 2018.
15. HELMIG, R.; WEISS, A.; WOHLMUTH, B. I. Variational Inequalities for Modeling Flow in Heterogeneous Porous Media with Entry Pressure. *Computational Geosciences*. 2009, s. 1–17.
16. MCWHORTER, D. B.; SUNADA, D. K. Reply to "Comment on 'Exact integral solutions for two-phase flow'" by Z.-X. Chen, G. S. Bodvarsson, and P. A. Witherspoon. *Water Resources Research*. 1992, vol. 28, no. 5, s. 1479–1479.
17. FUČÍK, R.; MIKYŠKA, J.; BENEŠ, M.; ILLANGASEKARE, T. H. Semianalytical Solution for Two-Phase Flow in Porous Media with a Discontinuity. *Vadose Zone Journal*. 2008, vol. 7, no. 3, s. 1001–1007.
18. BJØRNARÅ, T. I.; MATHIAS, S. A. A pseudospectral approach to the McWhorter and Sunada equation for two-phase flow in porous media with capillary pressure. *Computational Geosciences*. 2013, vol. 17, no. 6, s. 889–897.
19. SOLOVSKÝ, J.; FUČÍK, R.; ŠÍSTEK, J. BDDC for MHFEM discretization of unsteady two-phase flow in porous media. *in review in Computer Physics Communications*. 2021.

Ing. Radek Fučík, Ph.D.

Vzdělání

- 2006 – 2010: doktorské studium na ČVUT v Praze, FJFI, obor Matematické inženýrství. Dizertační práce *Advanced Numerical Methods for Modelling Two-Phase Flow in Heterogeneous Porous Media*
- 2000 – 2006: magisterské studium na ČVUT v Praze, FJFI, obor Matematické inženýrství. Diplomová práce *Numerical Analysis of Multiphase Porous Media Flow in Groundwater Contamination Problems*.

Zaměstnání

- od roku 2011: odborný asistent, ČVUT v Praze, Katedra matematiky FJFI
- 2006 – 2011: odborný pracovník v oborech technických, ČVUT v Praze, Katedra matematiky FJFI

Zahraniční spolupráce a pobyty v zahraničí

- 2007: letní škola CEMRACS 2007, Centre International de Rencontres Mathématiques, Luminy, Francie (1,5 měsíce)
- 2012: postdoktorská stáž na Colorado School of Mines, Golden, USA (4 měsíce)
- od 2012: visiting research associate, Colorado School of Mines, Golden, USA, Environmental Engineering
- kratší pobyty:
 - průběžně: Colorado School of Mines, Golden, USA: 1 až 2 týdny ročně od roku 2006
 - 2018: Kanazawa University, Kanazawa, Japonsko
 - 2020: AGH University of Science and Technology, Kraków, Polsko

Vlastní řešené projekty

- *Výpočetní modely a experimentální zkoumání dynamiky tekutin, přestupu hmoty, transportu látek a fázových přechodů v porézním prostředí v problematice ochrany životního prostředí*, mezinárodní projekt MŠMT InterExcelence – InterAction LTAUSA19021, 2020-2022, řešitel R. Fučík.
- *Vývoj a aplikace pokročilých metod matematického modelování přírodních a průmyslových procesů s využitím vysoce výkonné výpočetní techniky*, Studentská grantová soutěž ČVUT, 2020–2022, SGS20/184/OHK4/3T/14, řešitel R. Fučík.
- *Aplikace pokročilých superpočítačových metod v matematickém modelování přírodních procesů*, Studentská grantová soutěž ČVUT, 2017–2019,

SGS17/194/OHK4/3T/14, řešitel R. Fučík.

- *Pokročilé superpočítačové metody pro matematické modelování přírodních procesů*, Studentská grantová soutěž ČVUT, SGS14/206/OHK4/3T/14, 2014–2016, řešitel R. Fučík.
- *Pokročilé superpočítačové metody implementace matematických modelů*, Studentská grantová soutěž ČVUT, SGS11/161/OHK4/3T/14, 2011–2013, řešitel R. Fučík.
- *Matematický model vícefázového proudění podzemní vody zahrnující dynamický efekt v modelech pro kapilární tlak*, interní grant ČVUT v Praze č. CTU0803514/2008, řešitel R. Fučík.

Spoluřešitel projektu

- *Large structures in boundary layers over complex surfaces under high Reynolds numbers*, projekt GAČR č. 18-09539S, 2018-2020, řešitelka RNDr. K. Jurčáková, Ph.D., ÚT AV ČR, spoluřešitel R. Fučík.

Účast na projektech

- *Multiphase flow, transport, and structural changes related to water freezing and thawing in the subsurface*, projekt GAČR č. 21-09093S, 2021-2023, řešitel doc. Ing. J. Mikyška, Ph.D.
- *Center for Advanced Applied Sciences, project of excellent research*, projekt MŠMT ČR, OPVVV č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000778, 2018–2022, řešitel prof. Ing. I. Jex, DrSc.
- *Research centre for Informatics*, projekt MŠMT ČR, OPVVV č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000765, 2018–2022.
- *Analysis of nature of flow and prediction of changes in endovascularly treated veins by MRI and mathematical modeling*, projekt č. NV19-08-00071 MZ ČR, 2019–2021, řešitel doc. Ing. J. Tintěra, CSc., IKEM Prague.
- *Investigation of shallow subsurface flow with phase transitions*, projekt GAČR č. 17-06759S, 2017–2019, řešitel doc. Ing. J. Mikyška, Ph.D.
- *Quantitative Mapping of Myocard and of Flow Dynamics by Means of MR Imaging for Patients with Nonischemic Cardiomyopathy - Development of Methodology*, projekt č. 15-27178A MZ ČR, 2015–2018, řešitel doc. Ing. J. Tintěra, CSc., IKEM Praha.
- *Dynamic Lithium-ion battery management for hybrid electric vehicles*, projekt č. TA04021244 TAČR, 2014–2017, řešitel prof. Ing. V. Havlena, CSc., Honeywell Prague Laboratory.
- *Development and Validation of Porous Media Fluid Dynamics and Phase Transi-*

tions Models for Subsurface Environmental Application, projekt MŠMT Kontakt II č. LH14003, 2014–2016, řešitel prof. Dr. Ing. M. Beneš.

- *Development of Computational Models for Simulation of CO₂ Sequestration*, projekt GAČR č. P105/11/1507, 2011–2013, řešitel doc. Ing. J. Mikyška, Ph.D.
- *Advanced Control and Optimization of Biofuel Co-Firing in Energy Production*, projekt č. TA01020871 TAČR, 2011–2013, řešitel prof. Ing. V. Havlena, CSc., Honeywell Prague Laboratory.
- *Numerical Methods for Multiphase Flow and Transport in Subsurface Environmental Applications*, projekt MŠMT Kontakt č. ME10009, 2010–2012, řešitel prof. Dr. Ing. M. Beneš.
- *Development and Validation of Porous Media Flow and Transport Models for Subsurface Environmental Application*, projekt MŠMT Kontakt č. ME10009, 2006–2009, řešitel prof. Dr. Ing. M. Beneš.
- *Jindřich Nečas Center for Mathematical Modelling*, Centrum základního výzkumu, hlavní řešitel prof. RNDr. J. Málek, CSc., MFF UK, 2006–2012.
- *Project Applied Mathematics in Technical and Physical Sciences* projekt MŠMT č. MSM6840770010, 2005–2011, řešitel prof. K. Kozel.

Publikace

- Autor 24 publikací indexovaných na Web of Science ¹ a 2 kapitol v monografiích.
- Web of Science ¹ zaznamenal 119 citací (bez auocitací), h-index 6
- Rezenze pro časopisy: Journal Of Computational Physics, Transport in Porous Media, Discrete & Continuous Dynamical Systems – S, Computational Geosciences, Advances in Water Resources.

Výuka a vedení studentů

- Garant a přednášející předmětů: Matematika 1, Matematika 2, Nelineární optimalizace, Mřížková Boltzmannova metoda. Přednášející předmětu Dynamika kontinua. Cvičící matematické analýzy pro studenty druhého ročníku FJFI.
- Školitel závěrečných prací: obhájeno 5 diplomových a 8 bakalářských prací, v roce 2021: 2 doktorandi, 1 magisterský a 3 bakalářští studenti
- Školitel-specialista: obhájena 1 disertační práce (CSM, Golden, USA), v roce 2021: 1 doktorand, 1 magisterský student

Další aktivity

- Autor a správce projektu `wikiskripta.fjfi.cvut.cz` – systému pro editaci studijních materiálů FJFI ČVUT v Praze.

¹stav k 28.7.2021