České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

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

Ing. Jiří Mikyška, Ph.D.

Matematické modelování transportu látek v podzemí

Mathematical modeling of transport of chemicals in the subsurface

Summary

This habilitation lecture deals with the mathematical model of transport of components of a multicomponent mixture in a porous medium. Depending on the local conditions, the mixture can occur in a single phase or in two phases. The model is formulated using the mass balance of each component, and Darcy's laws for all phases. Using the assumption of local thermodynamic equilibrium, the partitioning of components between the phases is described by means of the equilibrium thermodynamics. We assume that the phase behaviour of the mixture can be described using a single equation of state which describes the relation between the pressure, volume, temperature, and composition of the system in all phases. The pressure equation is discretized using the mixed-hybrid finite element method. The transport equations are discretized using the discontinuous Galerkin finite element method using the element-wise linear approximation of the total molar densities. This method is stabilized using the slope limiter.

The aim of this lecture is to introduce the formulation of a mathematical model describing two-phase flow of a compressible multicomponent mixture in a porous medium and point out several problems that are commonly ignored in the literature. One of them is, for example, the still unresolved problem of the correct formulation of boundary conditions in the two-phase compositional model. Next, we will discuss the stable way of approximation of the phase fluxes. At the end, we will show that when implementing the slope limiter in the higher-order method, some common formulation of the compositional model will break down. The main advantage of the higher-order methods is the substantial reduction of the numerical diffusion in comparison with the results obtained using the first-order method, which will be illustrated by several examples.

Souhrn

Tato habilitační přednáška pojednává o matematickém modelu transportu komponent vícesložkové směsi v porézním prostředí. V závislosti na vnějších podmínkách se směs může nacházet v jedné nebo dvou fázích. Model je formulován pomocí bilance hmoty každé komponenty, Darcyho zákona pro každou fázi. Za předpokladu lokální termodynamické rovnováhy je rozložení komponent mezi fázemi popsáno prostředky rovnovážné termodynamiky. Předpokládáme, že k popisu stavového chování směsi lze použít jedinou stavovou rovnici, která popíše vztah mezi tlakem, objemem, teplotou a složením systému ve všech fázích. Rovnice pro tlak je diskretizována smíšenou hybridní metodou konečných prvků. Transportní rovnice jsou diskretizovány nespojitou Galerkinovou metodou využívající po elementech lineární aproximaci celkových molárních hustot. Tato metoda je stabilizována použitím omezující funkce (tzv. limiteru).

Cílem této přednášky je představit formulaci modelu popisujícího dvoufázové proudění stlačitelné vícesložkové směsi v porézním prostředí a upozornit na některé problémy, které bývají v literatuře opomíjeny. Jedním z nich je např. stále otevřený problém korektní formulace okrajových podmínek pro dvoufázový kompoziční model. Dále budeme diskutovat stabilní způsob aproximace fázových toků. Nakonec ukážeme, že při implementaci omezující funkce v metodě vyššího řádu některé běžné formulace kompozičního modelu selhávají. Hlavní výhodou použití metody vyššího řádu přesnosti je podstatná redukce numerické difuze v porovnání s výsledky získanými metodou prvního řádu přesnosti, což bude ilustrováno na několika příkladech.

Klíčová slova

transport v porézním prostředí
vícefázové proudění vícesložkové směsi
lokální termodynamická rovnováha
smíšená hybridní metoda konečných prvků
nespojitá Galerkinova metoda
metody vyššího řádu přesnosti
omezující funkce

Keywords

transport in a porous medium
multiphase flow of a multicomponent mixture
local thermodynamic equilibrium
mixed-hybrid finite element method
discontinuous Galerkin method
higher-order methods
slope limiter

Obsah

1 Úvod **6**

2 Formulace kompozičního modelu **6**
2.1 Transportní rovnice 6
2.2 Přestup komponent mezi fázemi 7
2.3 Počáteční a okrajové podmínky 8

3 Numerické řešení kompozičního modelu **9**
3.1 Diskretizace celkového molárního toku 9
3.2 Aproximace rovnice pro tlak 11
3.3 Výpočet fázových toků 11
3.4 Aproximace transportních rovnic 12
3.5 Implementace omezující funkce 13

4 Ukázky numerických simulací **14**
4.1 Příklad 1: jednofázové proudění 15
4.2 Příklad 2: dvoufázové proudění 15

5 Shrnutí a závěr **16**

Literatura **16**

1 Úvod

Matematické modely transportu směsí chemických látek v porézním prostředí hrají důležitou roli při studiu mnoha procesů v přírodě i technice. Z různých aplikací můžeme jmenovat např. vtláčení CO_2 do podzemí za účelem trvalého uložení v horninovém masivu (prevence skleníkového efektu pomocí technologie Carbon Capture and Storage – CCS), injektáž plynu do ropných ložisek za účelem zvýšení jejich výtěžnosti, či řešení ekologických problémů vznikajících průnikem kontaminace do horninového prostředí. Při řešení těchto problémů je potřebné simulovat transport komponent vícesložkové směsi v porézním prostředí. Např. při vtlačování CO_2 do podzemí se superkritický CO_2 vtlačuje do rezervoáru, který obsahuje vodu a/nebo ropu. V závislosti na vnějších podmínkách může směs být homogenní (CO_2 se plně rozpustí ve vodě, resp. ropě) nebo se směs může rozdělit na dvě nebo více fází, které mají navzájem rozdílné hustoty a chemická složení. Pokud se směs rozdělí do dvou fází (v případě ropy např. plyn obsahující převážně CO_2 a lehčí alkany a kapalinu obsahující převážně těžší alkany a menší množství rozpuštěného CO_2) může dojít k tomu, že lehčí fáze bude mít výrazně nižší viskozitu než původní jednofázová směs, což povede ke zlepšení výtěžnosti rezervoáru.

Při ukládání CO_2 do podzemí za účelem trvalého uložení v hlubinných uložištích lze využít jedinečných vlastností směsí obsahujících CO_2. Je dobře známo, že při směšování CO_2 a vody při zadané teplotě a tlaku výsledná směs zaujme obecně jiný objem než je součet objemů vody a CO_2 před směšováním [14]. Směšování vody a CO_2 obecně vede ke změně hustoty směsi, jedná se tedy o silně neideální směsi. Stavové chování takovýchto směsí je třeba popisovat prostředky rovnovážné termodynamiky. Zároveň je potřeba konzistentně propojit tyto termodynamické výpočty s výpočtem proudění vícefázové směsi. To vede k modelům popisujícím transport komponent vícesložkových směsí, přičemž komponenty mohou přecházet mezi fázemi. Přestože jak termodynamika směsí, tak simulace transportu v pórézním prostředí jsou dobře rozvinuté disciplíny, ukazuje se, že propojení těchto dvou disciplín není triviální a je zdrojem mnoha problémů, které je potřeba řešit. Jedná se tedy o interdisciplinární problematiku propojující znalosti z termodynamiky směsí, mechaniky tekutin a termodynamiky kontinua spolu s poznatky z numerické matematiky a matematického modelování.

Cílem této přednášky je představit formulaci kompozičního modelu a ukázat metodu vyššího řádu přesnosti použitelnou pro simulaci výše uvedených problémů.

2 Formulace kompozičního modelu

2.1 Transportní rovnice

Budeme vyšetřovat dvoufázové stlačitelné proudění směsi n chemických komponent v porézním prostředí vymezeném oblastí Ω. Omezíme se na případ nestlačitelného porézního prostředí s porozitou ϕ, která může obecně záviset na poloze, tj. $\phi = \phi(\mathbf{x})$. Budeme uvažovat izotermální případ – tj. proudění při konstantní teplotě T. Bilanci hmoty pro každou komponentu lze zapsat ve tvaru

$$\frac{\partial(\phi c_i)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_i = F_i, \qquad i = 1, \ldots, n, \tag{1}$$

kde $c_i = c_i(\mathbf{x}, t)$ jsou neznámé celkové molární koncentrace jednotlivých komponent směsi, $\mathbf{q}_i$ je hustota molárního toku i-té komponenty a zdrojový člen F_i popisuje objemovou hustotu vtláčení, resp. čerpání i-té komponenty ve vyšetřované oblasti (počet molů dodaných do jednotkového objemu zeminy za jednotku času). V každém bodě $\mathbf{x} \in \Omega$ (a každém čase t) jsou v daném bodě

definovány koncentrace c_i všech komponent $i = 1, \ldots, n$. Jedná se tedy o model směsi pomocí překrývajících se kontinuí.

V závislosti na vnějších podmínkách se může v daném bodě směs vyskytovat buď v jedné nebo více fázích. Každá fáze α je charakterizována svým chemickým složením (přesněji souborem molárních koncentrací jednotlivých komponent ve fázi α), saturací (objemovým zlomkem) S_α a rychlostí. Neuvažujeme-li difuzi, pak rychlost všech komponent v dané fázi je stejná. Celková hustota molárního toku i-té komponenty je tedy dána předpisem

$$\mathbf{q}_i = \sum_\alpha c_{\alpha,i} \mathbf{v}_\alpha, \tag{2}$$

kde se sčítá přes všechny fáze α, $c_{\alpha,i}$ je molární koncentrace i-té komponenty ve fázi α a $\mathbf{v}_\alpha$ je rychlost fáze α. Předpokládáme, že rychlost fáze α je dobře popsána Darcyho zákonem tvaru [12, 2]

$$\mathbf{v}_\alpha = -\lambda_\alpha \mathbf{K}(\nabla p - \varrho_\alpha \mathbf{g}), \quad \lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\eta_\alpha}, \tag{3}$$

kde $\mathbf{K} = \mathbf{K}(\mathbf{x})$ označuje vlastní propustnost zeminy, p je tlak, $\varrho_\alpha = \sum_{i=1}^n c_{\alpha,i} M_i$ je hustota fáze α, M_i je molární hmotnost i-té komponenty a $\mathbf{g}$ označuje vektor gravitačního zrychlení. Mobilita λ_α fáze α je definována jako podíl relativní permeability $k_{r\alpha}$ fáze α a dynamické viskozity η_α fáze α. Relativní permeabilita $k_{r\alpha} : \langle 0, 1\rangle \mapsto \langle 0, 1\rangle$ je veličina popisující redukci permeability z důvodu přítomnosti ostatních fází. Obecně závisí na saturaci S_α fáze α

$$k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(S_\alpha) \tag{4}$$

a k jejímu modelování používáme buď lineární ($k_{r\alpha}(S_\alpha) = S_\alpha$) nebo kvadratický ($k_{r\alpha}(S_\alpha) = S_\alpha^2$) model. Podle zvoleného modelu závisí dynamická viskozita η_α fáze α na teplotě a molárních koncentracích fáze α, příp. tlaku p, teplotě T a molárních zlomcích jednotlivých komponent $x_{\alpha,i} = c_{\alpha,i}/c_\alpha$, kde $c_\alpha = \sum_{i=1}^n c_{\alpha,i}$ je celková molární koncentrace fáze α, tedy

$$\eta_\alpha = \eta_\alpha(T, c_{\alpha,1}, \ldots, c_{\alpha,n}), \qquad \text{resp.} \qquad \eta_\alpha = \eta_\alpha(p, T, x_{\alpha,1}, \ldots, x_{\alpha,n}). \tag{5}$$

Pro modelování této závislosti používáme model Lohrenze, Braye a Clarka [26].

2.2 Přestup komponent mezi fázemi

Uvedený model je třeba doplnit konstitutivními vztahy, které popíší vazby mezi celkovými koncentracemi c_i a počtem fází, fázovými koncentracemi $c_{\alpha,i}$ všech komponent ve všech fázích a saturacemi S_α všech fází. K modelování přestupu komponent mezi fázemi se běžně používá předpoklad lokální termodynamické rovnováhy, který je v daném kontextu dobře fyzikálně obhajitelný, neboť proudění v porézním prostředí je typicky velmi pomalé v porovnání s rychlostí přestupu komponent mezi fázemi. Podmínka stabilní termodynamické rovnováhy vede k minimalizaci celkové Gibbsovy energie složeného systému při zadané teplotě, tlaku a celkových molárních zlomcích jednotlivých komponent směsi [14, 28, 29]. Označme $z_i = c_i/c$, kde $c = \sum_{i=1}^n c_i$ je celková molární koncentrace směsi, celkové molární zlomky jednotlivých komponent pro $i = 1, \ldots, n$. Dále zaveďme molární zlomky jednotlivých komponent ve fázi α předpisem $x_{\alpha,i} = c_{\alpha,i}/c_\alpha$, kde $c_\alpha = \sum_{i=1}^n c_{\alpha,i}$ je celková koncentrace fáze α. Podmínka fázové rovnováhy vede k následující soustavě nelineárních algebraických rovnic

$$f_{oi}(p, T, x_{o,1}, \ldots, x_{o,n}) = f_{gi}(p, T, x_{g,1}, \ldots, x_{g,n}), \qquad i = 1, \ldots, n, \tag{6a}$$

$$z_i = (1 - \nu)x_{o,i} + \nu x_{g,i}, \qquad i = 1, \ldots, n, \tag{6b}$$

$$\sum_{i=1}^n z_i = \sum_{i=1}^n x_{o,i} = \sum_{i=1}^n x_{g,i} = 1, \tag{6c}$$

kde $f_{\alpha i}$ je fugacita komponenty i ve fázi α a $\nu \in (0,1)$ označuje molární zlomek plynné fáze (tj. počet molů plynné fáze ku celkovému počtu molů směsi). Zde uvažujeme pouze dvoufázový případ a formulujeme podmínku termodynamické rovnováhy pouze mezi dvěma fázemi označenými jako o (oil) a g (gas).

Pro zadané hodnoty tlaku p, teploty T a celkových molárních zlomků z_i všech komponent lze řešením soustavy (6) určit molární zlomky $x_{\alpha,i}$ všech komponent v obou fázích a molární zlomek plynné fáze ν. Dále lze určit fázové koncentrace c_α řešením stavové rovnice

$$p = p(T, 1/c_\alpha, x_{\alpha,1}, \ldots, x_{\alpha,n}), \qquad \alpha \in \{o, g\} \tag{7}$$

a dopočítat fázové saturace S_α řešením soustavy rovnic

$$c_o S_o + c_g S_g = c, \tag{8}$$

$$S_o + S_g = 1. \tag{9}$$

Koncentrace $c_{\alpha,i}$ jsou pak dány vzorcem $c_{\alpha,i} = c_\alpha x_{\alpha,i}$. Pokud je za daných podmínek (tj. tlaku p, teplotě T a celkových molárních zlomcích $z_1, \ldots, z_n$) směs stabilní [27], pak nedojde k rozkladu směsi na fáze. V tomto případě není třeba řešit systém (6), protože stačí položit $c_{\alpha,i} = c_i$ a $S_\alpha = 1$.

2.3 Počáteční a okrajové podmínky

Výše uvedený systém rovnic řešených na omezené d-rozměrné oblasti Ω je třeba doplnit o vhodné počáteční a okrajové podmínky, které je potřeba zvolit tak, aby výsledná úloha byla formulována korektně – tj. aby za daných podmínek existovalo právě jedno řešení, které bude spojitě záviset na vstupních datech úlohy. Navzdory své důležitosti je tato problematika v dostupné literatuře často opomíjena. Některé knihy, např. [7], se problematice okrajových podmínek nevěnují vůbec. V mnoha článcích se okrajové podmínky zmiňují pouze v souvislosti s konstrukcí numerického schématu, přičemž korektnost různých formulací okrajových podmínek je přinejmenším sporná. V článku [30] je ukázáno, že často používaná nulová Neumannova podmínka tvaru

$$\mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n} = -\lambda_\alpha \mathbf{K}(\nabla p - \varrho_\alpha \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} = 0, \qquad \forall \alpha \in \{o, g\}, \tag{10}$$

která vyjadřuje podmínku nepropustnosti pro každou fázi α na některé části hranice $\partial\Omega$, není korektní. Z podmínky (10) lze totiž ve dvoufázovém systému (kdy je $\lambda_\alpha \neq 0$ pro obě fáze $\alpha \in \{o, g\}$) odvodit, že

$$\nabla p \cdot \mathbf{n} = \varrho_g \mathbf{g} \cdot \mathbf{n} \qquad \text{a zároveň} \qquad \nabla p \cdot \mathbf{n} = \varrho_o \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}, \tag{11}$$

které nemohou být splněny zároveň ve dvoufázovém systému s gravitací, pokud mají obě fáze různé hustoty. Nelze tedy vynucovat nulovou Neumannovu podmínku pro každou fázovou rychlost, ale pouze pro celkový tok každé komponenty. Na základě zkušeností získaných s tímto modelem doplňujeme tedy rovnice kompozičního modelu následujícími počátečními a okrajovými podmínkami

$$c_i(\mathbf{x}, 0) = c_i^0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega,\ i = 1, \ldots, n, \tag{12a}$$

$$p(\mathbf{x}, t) = p^D(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_p,\ t \in I, \tag{12b}$$

$$\mathbf{q}_i(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_q,\ t \in I,\ i = 1, \ldots, n, \tag{12c}$$

v nichž $\mathbf{n}$ označuje jednotkový vektor vnější normály definovaný skoro všude na $\partial\Omega$, $\Gamma_p \cup \Gamma_q = \partial\Omega$, a $\Gamma_p \cap \Gamma_q = \emptyset$. Rovnice (12a) popisuje počáteční rozložení molárních koncentrací, (12b) je Dirichletova okrajová podmínka předepisující tlak p^D na části hranice Γ_p, a (12c) je homogenní Neumannova okrajová podmínka popisující nepropustnou část hranice Γ_q. Předpokládáme, že Γ_p je odtoková část hranice, takže na ní není třeba předepisovat žádné okrajové podmínky pro molární koncentrace.

3 Numerické řešení kompozičního modelu

Základním problémem, který je potřeba při numerickém řešení kompozičního modelu vyřešit, je výpočet tlaku, který není popsán žádnou evoluční rovnicí, ale je dán řešením systému implicitně. Hodnoty tlaku jsou potřebné jednak pro výpočty toků, jednak pro testování fázové stability a stanovení lokální fázové rovnováhy na každé výpočetní buňce, jelikož termodynamické výpočty se provádí při zadaném tlaku, teplotě a celkových molárních zlomcích jednotlivých komponent směsi. K formulaci rovnic popisujících evoluci tlaku je v literatuře dostupných několik metod [1, 42, 9, 10, 8, 40], které ovšem v zásadě vycházejí ze dvou základních přístupů. Prvním z nich je metoda založená na linearizaci systému rovnic (1)–(8) Newtonovou metodou, kdy se z diskrétní podoby rovnic pro přírůstky zvolených primárních proměnných (mezi nimiž je vždy tlak) eliminací ostatních proměnných odvodí redukovaný systém pouze pro přírůstky tlaku. Po vyřešení systému pro přírůstky tlaku se již přírůstky ostatních primárních proměnných neřeší, získané aproximace tlaků se použijí k výpočtu toků a pak se přejde k explicitnímu řešení transportních rovnic pro jednotlivé komponenty. Tuto verzi predikce tlaku v kompoziční simulaci poprvé použili Young a Stephenson [42]. Alternativní metodou pro predikci vývoje tlaku je metoda, kterou poprvé použili Ács, Farkas a Doleschell v práci [1], ve které se vhodnou kombinací transportních rovnic (1) odvodí evoluční rovnice pro tlak tvaru

$$\phi c_f \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \overline{v_i}\, \nabla \cdot (c_{o,i}\mathbf{v}_o + c_{g,i}\mathbf{v}_g) = \sum_{i=1}^{n} \overline{v_i} F_i, \tag{13}$$

kde c_f označuje koeficient celkové (dvoufázové) stlačitelnosti směsi a $\overline{v_i}$ je celkový (tj. dvoufázový) parciální molární objem i-té komponenty. Tyto koeficienty jsou funkcemi tlaku, teploty a molárních zlomků. Postup jejich výpočtu ze stavové rovnice je uveden v knize [14].

V následujících odstavcích popíšeme řešení systému rovnic (1)–(8) na dvourozměrné oblasti Ω pokryté obdélníkovou sítí s využitím rovnice pro tlak (13), kterou diskretizujeme smíšenou hybridní verzí metody konečných prvků nejnižšího řádu [3, 37]. V této metodě aproximujeme tlak současně s celkovým tokem, který je dále využit pro výpočet transportu. Tento přístup navazuje na práce [34, 16, 17, 18]. Transportní rovnice jsou řešeny nespojitou Galerkinovou metodou využívající po částech lineární nespojité bazické funkce [19, 11, 5]. Při použití metody vyššího řádu přesnosti je obecně nutné výsledná data poupravit s využitím vhodné omezující funkce, která zabrání vzniku nefyzikálních oscilací. Podrobnosti tohoto přístupu jsou uvedeny v [21, 22, 23, 24, 25, 15].

3.1 Diskretizace celkového molárního toku

Celkový molární tok $\mathbf{q}$ zavedeme předpisem

$$\mathbf{q} = c_o\mathbf{v}_o + c_g\mathbf{v}_g = -\sum_{\alpha'} c_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}\mathbf{K}(\nabla p - \widetilde{\varrho}\mathbf{g}), \tag{14}$$

kde $\widetilde{\varrho} = f_o\varrho_o + f_g\varrho_g$ a $f_\alpha = c_\alpha\lambda_\alpha / \sum_{\alpha'} c_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}$. Koeficient $\sum_{\alpha'} c_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}$ v rovnici (14) je vždy kladný, protože alespoň jedna fáze má vždy nenulovou mobilitu. Z rovnice (14) lze tedy vyjádřit gradient tlaku

$$\nabla p = -\frac{1}{\sum_{\alpha'} c_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{q} + \widetilde{\varrho}\mathbf{g}. \tag{15}$$

a ten dosadit do Darcyho zákona (3). Takto lze odvodit vyjádření celkových fázových toků pomocí celkového toku ve tvaru

$$\mathbf{q}_\alpha \equiv c_\alpha\mathbf{v}_\alpha = f_\alpha(\mathbf{q} - \mathbf{G}_\alpha), \tag{16}$$

kde

$$\mathbf{G}_\alpha = \begin{cases} c_o\lambda_o(\varrho_o - \varrho_g)\mathbf{Kg} & \alpha = g, \\ c_g\lambda_g(\varrho_g - \varrho_o)\mathbf{Kg} & \alpha = o. \end{cases} \tag{17}$$

Aproximaci celkového molárního toku hledáme v prostoru $RT_0(K)$ – tj. Raviartově-Thomasově prostoru nejnižšího stupně na každém elementu K (pro podrobnosti viz [37, 41, 4]). Aproximace celkového toku na elementu K je tedy tvaru

$$\mathbf{q}_K = \sum_{E\in\partial K} q_{K,E}\mathbf{w}_{K,E}, \tag{18}$$

kde koeficient $q_{K,E}$ udává celkový molární tok ve směru vnější normály přes hranu E z elementu K a $\mathbf{w}_{K,E}$ označuje bazické funkce prostoru $RT_0(K)$. Vlastnosti těchto bazických funkcí i podrobné odvození jejich tvaru lze najít v článku [30]. S použitím vlastností těchto bazických funkcí lze odvodit vyjádření koeficientů celkového molárního toku na libovolném elementu K pomocí průměrného tlaku na daném elementu p_K a průměrných tlaků na všech hranách elementu K (tzv. stopy tlaku) označených jako $\hat{p}_{K,E}$ ve tvaru

$$q_{K,E} = a_{K,E}p_K - \sum_{E'\in\partial K} b_{K,E,E'}\hat{p}_{K,E'} + d_{K,E}. \tag{19}$$

Koeficienty $a_{K,E}$, $b_{K,E,E'}$ a $d_{K,E}$ v této rovnici závisejí na geometrii sítě a na lokálních hodnotách celkové mobility. Vyjádření těchto koeficientů lze najít v článku [30]. Zákon zachování hmoty na hraně $E = K \cap K'$ oddělující dva sousední elementy K and K' vede k podmínce

$$q_{K,E} + q_{K',E} = 0, \qquad K \cap K' = E. \tag{20}$$

Dosazením z (19) dostaneme

$$a_{K,E}p_K - \sum_{E'\in\partial K} b_{K,E,E'}\hat{p}_{K,E'} + d_{K,E} + +a_{K',E}p_{K'} \quad - \sum_{E'\in\partial K'} b_{K',E,E'}\hat{p}_{K',E'} + d_{K',E} = 0. \tag{21}$$

Na hranách E ležící na neumannovské části hranice z rovnice (12c) odvodíme

$$q_{K,E} = 0, \qquad \text{a tedy} \qquad a_{K,E}p_K - \sum_{E'\in\partial K} b_{K,E,E'}\hat{p}_{K,E'} + d_{K,E} = 0. \tag{22}$$

Systém rovnic (21) a (22) lze zapsat v maticovém tvaru

$$R^T P - M\hat{P} = V, \tag{23}$$

kde

$$R \in \mathbb{R}^{N_K,N_E}, \qquad R_{K,E} = a_{K,E}, \tag{24a}$$

$$M \in \mathbb{R}^{N_E,N_E}, \qquad M_{E,E'} = \sum_{K:E,E'\in\partial K} b_{K,E,E'}, \tag{24b}$$

$$V \in \mathbb{R}^{N_E}, \qquad V_E = \sum_{K:E\in\partial K} d_{K,E}. \tag{24c}$$

V těchto rovnicích N_K označuje počet elementů, N_E je celkový počet hran, $P \in \mathbb{R}^{N_K}$ je vektor průměrných tlaků na jednotlivých elementech a $\hat{P} \in \mathbb{R}^{N_E}$ je vektor stop tlaků na jednotlivých hranách.

3.2 Aproximace rovnice pro tlak

Rovnici pro tlak (13) lze přeformulovat do následujícího tvaru

$$\phi c_f \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \overline{v_i} \, \nabla \cdot (m_i \mathbf{q} - \mathbf{s}_i) = \sum_{i=1}^{n} \overline{v_i} F_i, \tag{25}$$

kde $m_i = x_{o,i} f_o + x_{g,i} f_g$ a $\mathbf{s}_i = x_{o,i} f_o \mathbf{G}_o + x_{g,i} f_g \mathbf{G}_g$. Tuto rovnici lze integrovat přes libovolný element K. Předpokládáme-li, že koeficienty c_f a $\overline{v_i}$ jsou po elementech konstantní, odvodíme s využitím divergenční věty

$$\phi_K c_{f,K} |K| \frac{\partial p_K}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \overline{v_{i,K}} \sum_{E \in \partial K} \int_E (m_{i,K,E} q_{K,E} - \mathbf{s}_{i,K,E} \cdot \mathbf{n}_{K,E}) = \sum_{i=1}^{n} \overline{v_{i,K}} F_{i,K} |K|, \tag{26}$$

kde $|K|$ označuje plochu elementu K. Dosazením celkového toku z (19) a použitím zpětné Eulerovy metody odvodíme následující schéma

$$DP^{n+1} - \tilde{R}\hat{P}^{n+1} = G, \tag{27}$$

kde horní index $n+1$ označuje časovou hladinu, $D \in \mathbb{R}^{N_K, N_K}$ je diagonální matice s elementy

$$D_{K,K} = \frac{\phi_K c_{f,K} |K|}{\Delta t} + \sum_{i=1}^{n} \overline{v_{i,K}} \sum_{E \in \partial K} \int_E m_{i,K,E} a_{K,E},$$

$\tilde{R} \in \mathbb{R}^{N_K, N_E}$ je obdélníková matice s prvky

$$\tilde{R}_{K,E'} = \sum_{i=1}^{n} \overline{v_{i,K}} \sum_{E \in \partial K} \int_E m_{i,K,E} b_{K,E,E'},$$

a $G \in \mathbb{R}^{N_K}$ je vektor se složkami

$$G_K = \frac{\phi_K c_{f,K} |K|}{\Delta t} p_K^n - \sum_{i=1}^{n} \overline{v_{i,K}} \sum_{E \in \partial K} \int_E (m_{i,K,E} d_{K,E} - \mathbf{s}_{i,K,E} \cdot \mathbf{n}_{K,E}) + |K| \sum_{i=1}^{n} \overline{v_{i,K}} F_{i,K}.$$

Koeficienty c_f, $\overline{v_i}$, $m_{i,K,E}$ a $\mathbf{s}_{i,K,E}$ se vyčíslují pomocí průměrných hodnot fázových koncentrací a saturací na elementu K ve staré časové vrstvě n.

3.3 Výpočet fázových toků

Důležitým krokem v metodě IMPEC je korektní aproximace fázových toků $\mathbf{q}_\alpha = f_\alpha(\mathbf{q} - \mathbf{G}_\alpha)$. V článku [30] zobecňujeme metodu, kterou dříve Sammon [38] použil při simulaci dvoufázového nemísitelného proudění, na problém kompoziční simulace. Nejprve je třeba vyřešit soustavu rovnic (23) a (27). Tím získáme tlaky na jednotlivých elementech P a stopy tlaku na hranách $\hat{P}$ na nové časové hladině. Protože matice D je diagonální a invertovatelná, je možno redukovat soustavu (23) a (27) na soustavu rovnic pro stopy tlaku tvaru [31]

$$(M - R^T D^{-1} \tilde{R}) \hat{P}^{n+1} = V - R^T D^{-1} G \tag{28}$$

Soustavu (28) řešíme pomocí přímého řešiče. Řešením tohoto systému získáme stopy tlaků $\hat{P}^{n+1}$ na nové časové hladině. Průměrné hodnoty tlaků na jednotlivých elementech P^{n+1} lze potom získat z rovnice (27). Potom můžeme vypočítat celkový molární tok pomocí rovnice (19).

Rovnice (20) zaručuje splnění bilance celkového molárního toku na každé vnitřní hraně mezi dvěma elementy sítě. Pokud bychom ovšem chtěli vypočítat fázové toky pomocí (16), zjistíme, že při použití lokálních hodnot koeficientů f_α a $\mathbf{G}_\alpha$ na elementu K dostaneme rozdílné hodnoty normálové složky fázových toků na hraně E podle toho, z které strany hrany E koeficienty vyčíslujeme. Abychom dostali konzervativní pole, průměrujeme hodnoty ϱ_α používané pro výpočet $\mathbf{G}_\alpha$ v rovnici (16) pomocí aritmetického průměru hodnot na sousedících elementech, zatímco hodnoty koeficientů $c_\alpha\lambda_\alpha$ a $c_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}$ při vyčíslení f_α se berou ze strany, která je proti směru k toku $\mathbf{q}_\alpha$ (tzv. upwind). Zde ovšem narážíme na problém, že směr $\mathbf{q}_\alpha$ ještě není znám. Tento problém lze vyřešit následujícím postupem. Označme symbolem α fázi, pro kterou platí, že

$$\operatorname{sgn} q_{K,E} = -\operatorname{sgn} \mathbf{G}_\alpha \cdot \mathbf{n}_{K,E}, \tag{29}$$

kde $c_\alpha\lambda_\alpha$ a $c_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}$ se zvolí libovolně, např. $c_\alpha\lambda_\alpha = c_{\alpha'}\lambda_{\alpha'} = 1$. Symbolem α' označíme zbývající fázi. Alespoň jedna z přítomných fází vždy splní podmínku (29), protože celkový tok je předem dán a vektory $\mathbf{G}_\alpha$ a $\mathbf{G}_{\alpha'}$ ukazují do navzájem opačných směrů, viz (17). Z podmínky (29) plyne, že fáze α směřuje stejným směrem jako celkový tok, přesněji $\operatorname{sgn} q_{\alpha,K,E} = \operatorname{sgn} q_{K,E}$ nezávisle na tom, jaké jsou skutečné hodnoty nezáporného koeficientu $c_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}$ v rovnici (16). Známé znaménko $q_{\alpha,K,E}$ umožňuje najít upwindovou hodnotu výrazu $c_\alpha\lambda_\alpha$, který se vyskytuje ve výpočtu vektoru $\mathbf{G}_{\alpha'}$. Je tedy možno vypočítat $q_{\alpha',K,E}$ a stanovit upwindovou hodnotu koeficientu $\lambda_{\alpha'}$ (koeficient bereme ze strany proti směru $q_{\alpha',K,E}$) a nakonec stanovit skutečnou hodnotu $q_{\alpha,K,E}$. V posledním kroku se změní pouze hodnota toku, nikoliv však jeho směr. Proto nakonec dostaneme konzistentní aproximaci fázových toků takovou, že koeficienty $c_\alpha\lambda_\alpha$ a $c_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}$ při vyčíslení f_α se berou ze strany, která je proti směru příslušného fázového toku, jak jsme chtěli. Tyto fázové toky dále využijeme při řešení transportních rovnic. Poznamenejme, že prosté průměrování hodnot toků z obou stran není možné, protože vede ke schématu, které je nepodmíněně nestabilní.

3.4 Aproximace transportních rovnic

Transportní rovnice (1) diskretizujeme nespojitou Galerkinovou metodou konečných prvků [19, 11, 5, 13]. Na každém obdélníkovém elementu K aproximujeme neznámé koncentrace jednotlivých komponent lineárními funkcemi, které ovšem nemusí být spojité přes hranice elementů. Na každém elementu tedy máme pro každou koncentraci 3 stupně volnosti – hodnotu koncentrace uprostřed elementu a hodnoty složek gradientu ve směru os x a y. Aproximace tedy uvažujeme ve tvaru

$$c_{i,K} = \sum_{l=1}^{3} c^l_{i,K}\varphi_{K,l}, \qquad c_{\alpha,i,K} = \sum_{l=1}^{3} c^l_{\alpha,i,K}\varphi_{K,l}, \tag{30}$$

kde $\varphi_{K,l}$ jsou bazické funkce lokálního prostoru lineárních funkcí na elementu K. Detailní odvození tvaru těchto funkcí je provedeno v článku [30]. Násobením transportních rovnic testovací funkcí, integrací přes element K a použitím Greenovy věty lze odvodit následující schéma nespojité Galerkinovy metody

$$\begin{aligned}\int_K \phi\frac{\partial c_{i,K}}{\partial t}\varphi_{K,j} - \int_K (x_{o,i,K}\mathbf{q}_o + x_{g,i,K}\mathbf{q}_g)\cdot\nabla\varphi_{K,j} + \\ + \sum_{E\in\partial K}\int_E \left(\widetilde{x_{o,i,K,E}}\mathbf{q}_o + \widetilde{x_{g,i,K,E}}\mathbf{q}_g\right)\cdot\mathbf{n}_{K,E}\varphi_{K,j} = \int_K F_i\varphi_{K,j},\end{aligned} \tag{31}$$

které platí pro každý stupeň volnosti $j \in \{1,2,3\}$. V integrálu přes hranici elementu označuje $\widetilde{x_{\alpha,i,K,E}}$ pro $\alpha \in \{o,g\}$ hodnotu molárního zlomku z upwindové strany vzhledem k toku $\mathbf{q}_\alpha$, tj.

$$\widetilde{x_{\alpha,i,K,E}} = \begin{cases} x_{\alpha,i,K,E} & \text{pokud } q_{\alpha,K,E} \equiv \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{n}_{K,E}|E| \geq 0, \\ x_{\alpha,i,K',E} & \text{pokud } q_{\alpha,K,E} \equiv \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{n}_{K,E}|E| < 0, \end{cases} \tag{32}$$

kde předpokládáme, že $E = K \cap K'$ je společná hrana mezi sousedními elementy K a K'. Pokud hrana E leží na hranici, pak lze na vtokové části hranice použít Dirichletovy okrajové podmínky. Hodnoty $x_{\alpha,i,K,E}$ a $x_{\alpha,i,K',E}$ v rovnici (32) získáme řešením lokální fázové rovnováhy na hranách elementů při teplotě T, tlaku $\hat{p}_{K,E}$ a celkových molárních koncentracích z_i na příslušné hraně. Hodnoty z_i na hraně se spočte pomocí hodnot z_i uprostřed elementu a složek gradientů, které jsou k dispozici při použití nespojité Galerkinovy metody. Hodnoty $x_{\alpha,i,K}$ v integrálu přes element K v rovnici (31) vypočítáme řešením lokální termodynamické rovnováhy při teplotě T, tlaku p_K a celkových molárních zlomcích z_i uprostřed elementu. K dosažení vyššího řádu přesnosti je tedy potřeba na každém elementu řešit 5 problémů fázové rovnováhy.

Dosazením (30) do (31) odvodíme následující semidiskrétní schéma

$$\phi_K \sum_{l=1}^{3} \frac{dc_{i,K}^l}{dt} M_{j,l}^K - \sum_{\alpha\in\{o,g\}} \sum_{l=1}^{3} x_{\alpha,i,K} \sum_{E\in\partial K} q_{\alpha,K,E} M_{j,l}^{K,E} + \\ + \sum_{E\in\partial K} \sum_{\alpha\in\{o,g\}} \widetilde{x_{\alpha,i,K,E}} q_{\alpha,K,E} M_j^E = \int_K F_i \varphi_{K,j}. \tag{33}$$

Matice M^K, M^E, a $M^{K,E}$ obsahují integrály bazických funkcí a jsou odvozeny v článku [30]. Protože matice M^K je diagonální, vede aproximace časové derivace dopřednou diferencí k explicitnímu schématu pro 3 neznámé stupně volnosti $c_{i,K}^l$ na každém elementu K.

3.5 Implementace omezující funkce

Výše popsané schéma nespojité Galerkinovy metody je potřeba stabilizovat použitím omezující funkce (tzv. limiter), která zabrání vzniku umělých oscilací numerického řešení. Na obdélníkové síti lze omezení sklonů provádět nezávisle na sobě pro oba směry x a y. Podstata metody spočívá v tom, že sklony získané použitím nespojité Galerkinovy metody po každém časovém kroku modifikujeme tak, aby se průměrná hodnota numerického řešení na každém elementu nezměnila a aby hodnoty celkových koncentrací na každé hraně ležely mezi minimem a maximem hodnot příslušné koncentrace uprostřed sousedních buněk. Vzhledem k tomu, že jako stupně volnosti na každém elementu používáme 1) průměrné hodnoty celkových molárních koncentrací, 2) rozdíly hodnot koncentrací na pravé hraně a uprostřed elementu a 3) rozdíly hodnot koncentrací na horní hraně a uprostřed elementu, lze uvedenou metodu snadno implementovat. Zároveň lze snadno získat metodu konečných objemů, pokud oba sklony nastavíme na nulu.

Při implementaci tohoto limiteru narážíme na zajímavý problém. Při kompoziční simulaci se běžně místo původního systému rovnic (1) pro všechny komponenty $i \in \{1,2,\ldots,n\}$ formuluje ekvivalentní úloha ve tvaru

$$\frac{\partial(\phi c_i)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_i = F_i, \qquad i = 1,\ldots,n-1, \tag{34}$$

$$\frac{\partial(\phi c)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = F \equiv \sum_{i=1}^{n} F_i, \tag{35}$$

což jsou bilanční rovnice pro prvních $n-1$ komponent doplněné bilanční rovnicí celé směsi. Při použití metod prvního řádu přesnosti (např. metody konečných objemů) jsou obě formulace

ekvivalentní a fungují stejně dobře. Při použití metody vyššího řádu se obě formulace začnou odlišovat ve způsobu aplikace limiteru. Limiter lze snadno aplikovat v případě původní formulace (1) pro $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$. Po každém kroku nespojité Galerkinovy metody limiter definuje horní a dolní meze $c^E_{i,max}$ a $c^E_{i,min}$ hodnot celkových koncentrací na každé hraně E následujícím způsobem

$$c^E_{i,max} = \max\{c_{i,K}, c_{i,K'}\}, \qquad c^E_{i,min} = \min\{c_{i,K}, c_{i,K'}\}, \tag{36}$$

kde K a K' jsou elementy sítě přiléhající k hraně E. Pokud je potřeba, sklon numerického řešení na každém elementu K se redukuje tak, aby na každé hraně byly splněny nerovnosti

$$c^E_{i,min} \le c^{K,E}_i \le c^E_{i,max}, \tag{37}$$

kde $c^{K,E}_i$ označuje hodnotu celkové molární koncentrace i-té komponenty uprostřed hrany E zrekonstruované pomocí 3 stupňů volnosti na elementu K. Vysčítáním nerovností (37) přes $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$ dostaneme pro celkovou molární koncentraci směsi omezení

$$\sum_{i=1}^{n} c^E_{i,min} \le c^{K,E} \equiv \sum_{i=1}^{n} c^{K,E}_i \le \sum_{i=1}^{n} c^E_{i,max}. \tag{38}$$

Pokud stejný postup použijeme v alternativní formulaci (34), pak limiter bude definovat dolní a horní meze $c^E_{i,min}$ a $c^E_{i,max}$ omezující hodnoty celkových molárních koncentrací c_i pro $i = 1, \ldots, n-1$ a dále meze c^E_{min} a c^E_{max} omezující hodnoty celkové koncentrace c na každé hraně E. Sklony těchto proměnných se budou případně redukovat tak, aby

$$\begin{aligned} c^E_{i,min} \le c^{K,E}_i \le c^E_{i,max}, \qquad & i = 1, \ldots, n-1 \\ c^E_{min} \le c^{K,E} \le c^E_{max}. & \end{aligned} \tag{39}$$

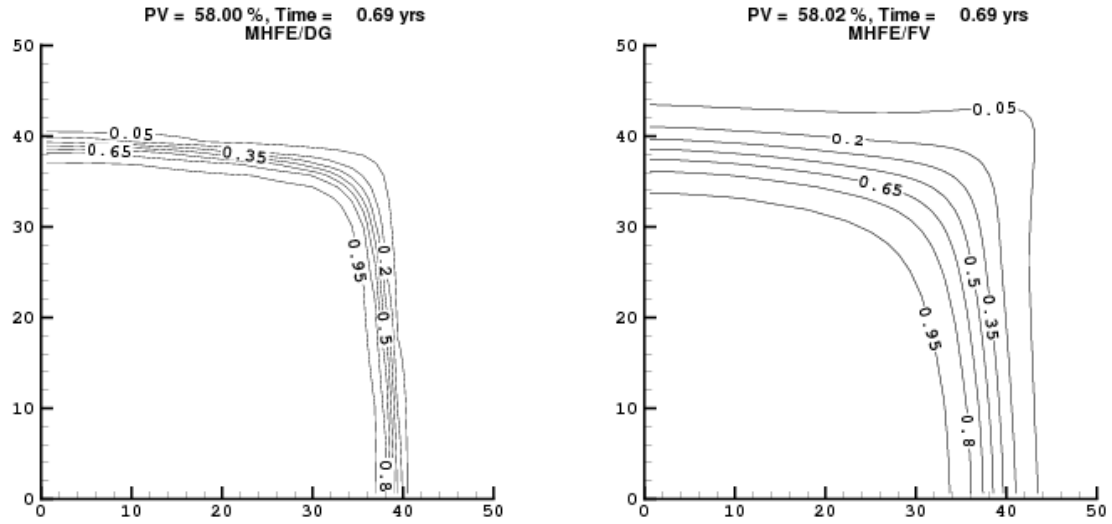
Z těchto nerovností můžeme pro poslední komponentu c_n odvodit nerovnost

$$c^E_{min} - \sum_{i=1}^{n-1} c^E_{i,max} \le c^{K,E}_n = c^{K,E} - \sum_{i=1}^{n-1} c^{K,E}_i \le c^E_{max} - \sum_{i=1}^{n-1} c^E_{i,min}. \tag{40}$$

Tato nerovnost však není v souladu s podmínkou (37) pro $i = n$. Použití metody vyššího řádu a limiteru ve formulaci (34) vede ke vzniku nefyzikálních oscilací koncentrace poslední komponenty, které se během několika málo časových kroků rozšíří i do dalších komponent. Problém lze vyřešit konstrukcí speciálního limiteru, který bude nastavovat meze celkové koncentrace tak, aby byly zajištěny správné meze hodnot poslední komponenty c_n. Tento postup však vede ke zbytečně složitému kódu. Jednodušší řešení je vycházet z původní formulace (1) pro $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$, ve které splnění nerovností (37) zajistí stabilitu řešení pro dostečně malé časové kroky (při splnění tzv. CFL-podmínky).

4 Ukázky numerických simulací

V této části ukážeme výsledky numerických simulací získané výše popsanou metodou. Výsledky získané metodou vyššího řádu (kombinace smíšené hybridní metody konečných prvků a nespojité Galerkinovy metody – MHFE/DG) porovnáme s metodou prvního řádu založené na kombinaci smíšené hybridní metody konečných prvků a metody konečných objemů (MHFE/FV). Výhodou metody vyššího řádu je podstatná redukce numerické difuze při zachování stability schématu, což demonstrujeme na následujících příkladech.



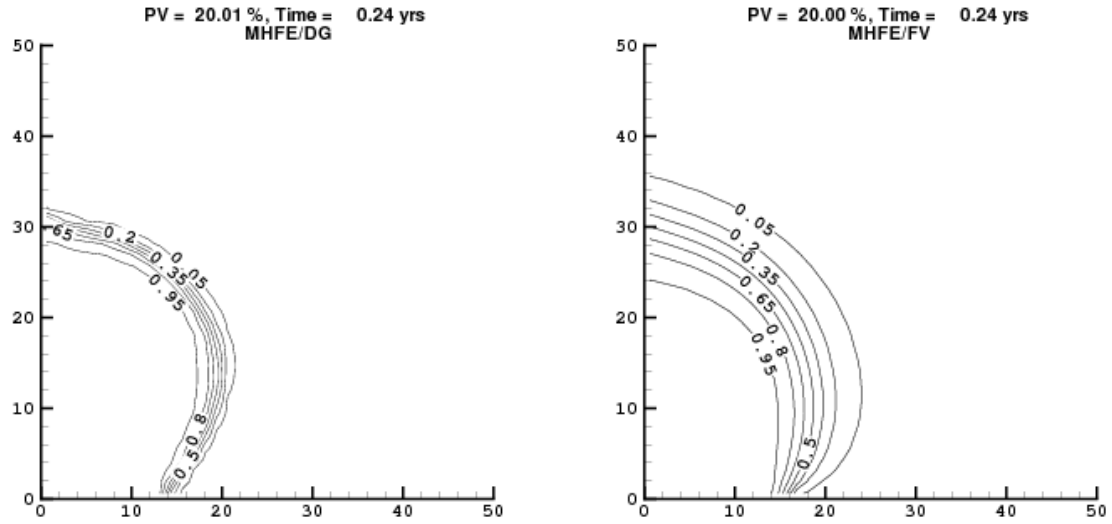
Obrázek 1: Celkové molární zlomky metanu po injektáži 58% pórového objemu metanu (0,69 roku) vypočtené na síti 40×40 pomocí metod MHFE/DG (vlevo) a MHFE/FV (vpravo): Příklad 1 bez gravitace.

4.1 Příklad 1: jednofázové proudění

V prvním příkladu simulujeme vytlačování propanu metanem ve vodorovné 2D oblasti o velikosti 50×50 m bez gravitace při konstantní teplotě $T = 397$ K. Porozita rezervoáru je $\phi = 0{,}2$ a vlastní propustnost $K = 10$ mD. Metan je vtláčen v levém dolním rohu, zatímco směs je čerpána v pravém horním rohu, kde je udržován konstantní tlak 50 bar. Za těchto podmínek směs zůstává v jedné fázi po celou dobu simulace. Rychlost vtláčení je 42,5 m^2/den při tlaku $p = 1$ atm a teplotě $T = 293$ K. Pro tuto simulaci používáme lineární model relativní permeability ($k_{r\alpha}(S_\alpha) = S_\alpha$). Na obrázku 1 vidíme molární zlomky metanu po injektáži 58% pórového objemu metanu vypočtené oběma metodami na čtvercové síti 40×40, odkud je vidět ostřejší reprezentace postupujícího rozhraní při použití metody vyššího řádu v porovnání s metodou prvního řádu, která je podstatně difuznější. Pokud stejný problém řešíme na svislé oblasti (tj. uvažujeme vliv gravitace), pak dostaneme výsledky zobrazené na obrázku 2, kde jsou zobrazeny molární zlomky metanu po vtlačení 20% pórového prostoru metanu. I v tomto případě metoda vyššího řádu přesnosti má podstatně nižší numerickou difuzi v porovnání s metodou prvního řádu.

4.2 Příklad 2: dvoufázové proudění

Opět simulujeme vytlačování propanu metanem ve 2D oblasti o velikosti 50×50 m při konstantní teplotě $T = 311$ K. Porozita rezervoáru je $\phi = 0{,}2$ a vlastní propustnost $K = 10$ mD. Metan je vtláčen v levém dolním rohu a směs je odčerpávána v pravém horním rohu, kde je udržován tlak $p = 69$ bar. Za těchto podmínek se v části oblasti objeví dvoufázová oblast. Rychlost vtláčení je 0,017 m^2/den při tlaku $p = 1$ atm a teplotě $T = 293$ K. Opět používáme lineární model relativní permeability. Na obrázku 3 vidíme molární zlomky metanu po vtlačení 50% pórového objemu metanu vypočtené oběma metodami na čtvercové síti 20×20 v případě, že neuvažujeme gravitaci (vodorovná oblast). Pokud uvažujeme vliv gravitace (svislá oblast), pak získáme výsledky zobrazené na obrázku 4. I v těchto příkladech jasně vidíme podstatnou redukci



Obrázek 2: Celkové molární zlomky metanu po injektáži 20% pórového objemu metanu (0,24 roku) vypočtené na síti 40×40 pomocí metod MHFE/DG (vlevo) a MHFE/FV (vpravo): Příklad 1 s gravitací.

numerické difuze při použití metody vyššího řádu přesnosti.

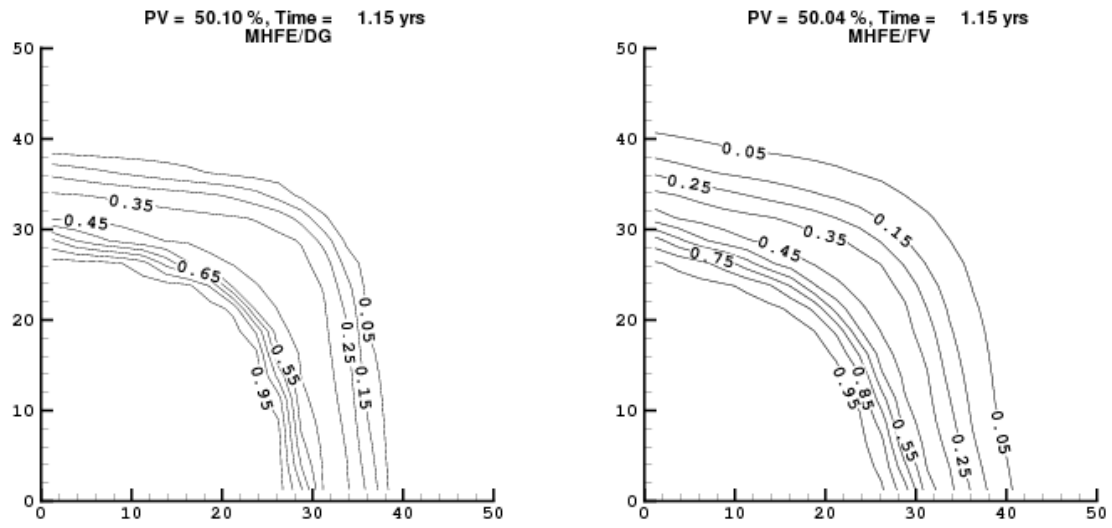
5 Shrnutí a závěr

V této přednášce jsme prezentovali formulaci kompozičního modelu popisujícím transport komponent směsi ve dvou fázích a ukázali na některé problémy objevující se při numerickém řešení tohoto modelu. Předvedené numerické simulace ukazují výhodu použití metod vyššího řádu přesnosti – podstatnou redukci numerické difuze oproti řešení získanému metodou prvního řádu přesnosti. Uvedený model je možno dále rozšiřovat a vylepšovat. Do modelu lze zahrnout např. difuzi komponent v každé fázi nebo kapilaritu. Lze simulovat i třífázové problémy zahrnující 2 kapalné fáze (vodu a uhlovodíkovou kapalnou fázi) a plyn. Takové modely mohou simulovat zvyšování výtěžnosti ropného rezervoáru pomocí technologie WAG (water alternating gas injection - střídavá injektáž vody a plynu do ropného ložiska). V současné době studujeme i možnosti použití alternativních termodynamických formulací problému fázové rovnováhy [32, 33, 20, 36]. Popis těchto zajímavých problémů je však na rámec tohoto textu. Daná problematika tedy stále představuje zdroj mnoha otevřených zajímavých problémů s praktickými aplikacemi.

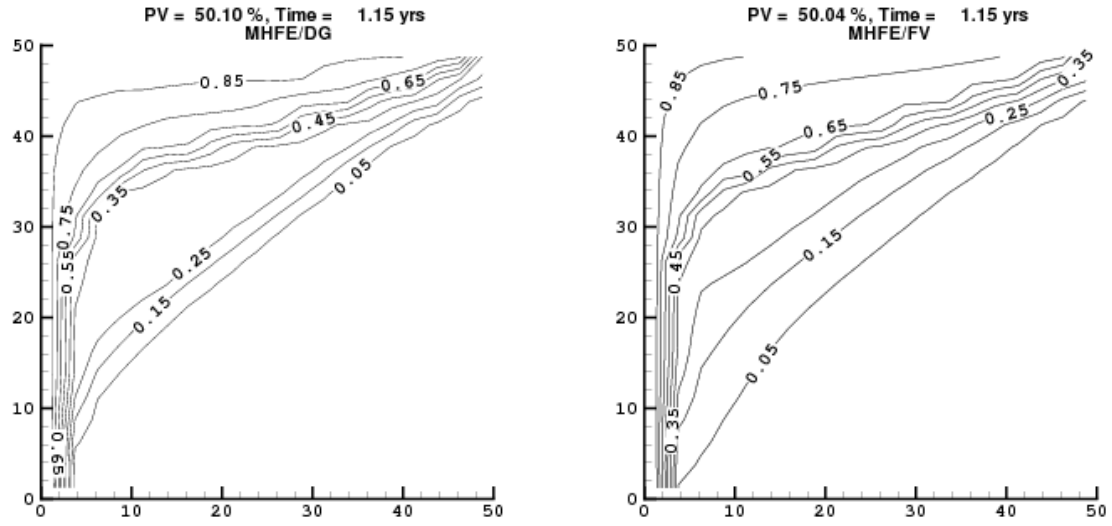
Literatura

[1] Ács, G., Doleschall, S., Farkas, É. (1985), General Purpose Compositional Model, *SPE Journal*, 25(4): 543–553. SPE-10515-PA.

[2] Bear, J., Verruijt, A. (1987), *Modeling Groundwater Flow and Pollution*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland.



Obrázek 3: Celkové molární zlomky metanu po injektáži 50% pórového objemu metanu (1,15 roku) vypočtené na síti 20×20 pomocí metod MHFE/DG (vlevo) a MHFE/FV (vpravo): Příklad 2 bez gravitace.



Obrázek 4: Celkové molární zlomky metanu po injektáži 50% pórového objemu metanu (1,15 roku) vypočtené na síti 20×20 pomocí metod MHFE/DG (vlevo) a MHFE/FV (vpravo): Příklad 2 s gravitací.

[3] Brezzi, F., Fortin, M. (1991), *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, Springer, New York.

[4] Chavent, G., Roberts, J.E. (1991), A unified physical presentation of mixed, mixed-hybrid finite elements and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems, *Advances in Water Resources*, 14(6): 329–348.

[5] Chen, Z., Cockburn, B., Jerome, J., W., and Shu, C.-W. (1995), Mixed-RKDG Finite Element Methods for the 2-D Hydrodynamic Model for Semiconductor Device Simulation, *VLSI Design*, 3(2):145–158.

[6] Chen, Z., Ewing, R. E. (1997), *From Single-Phase To Compositional Flow: Applicability Of Mixed Finite Elements*, in Transport in Porous Media, 225–242.

[7] Chen, Z., Ma Y., Huan, G. (2006), *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*, SIAM, Philadelphia.

[8] Coats, K. H. (1980), An equation of state compositional model, *SPE Journal*, October:363–376.

[9] Coats, K. H. (1982), Reservoir Simulation: State of the Art, *Journal of Petroleum Technology*, August:1633–1642.

[10] Coats, K. H., Thomas, L.K., Pierson, R. G. (1998), Compositional and Black Oil Reservoir Simulation, *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, August: 372–379.

[11] Cockburn, B., Shu, C.-W. (2001), Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Methods for Convection Dominated Problems, *Journal of Scientific Computing*, 16(3):173–261.

[12] Darcy, H. (1856), *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*, Victor Dalmond, Paris.

[13] Feistauer, M., Felcman, J., Straškraba, I. (2003), *Mathematical and Computational Methods for Compressible Flow*, Clarendon Press, Oxford.

[14] Firoozabadi, A. (1999), *Thermodynamics of Hydrocarbon Reservoirs*, McGraw-Hill, New York.

[15] Hoteit, H., Ackerer, P., Mosé, R., Erhel, J., Phillipe, B. (2004), New two-dimensional slope limiters for discontinuous Galerkin methods on arbitrary meshes, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 61:2566–2593.

[16] Hoteit, H., Firoozabadi, A. (2005), Multicomponent fluid flow by discontinuous Galerkin and mixed methods in unfractured and fractured media, *Water Resources Research*, 41 W11412, doi:10.1029/2005WR004339.

[17] Hoteit, H., Firoozabadi, A. (2006), Compositional Modeling by the Combined Discontinuous Galerkin and Mixed Methods, *SPE Journal*, March 2006.

[18] Hoteit, H., Firoozabadi, A. (2006), Compositional Modeling of Discrete-Fractured Media Without Transfer Fuctions by the Discontinuous Galerkin and Mixed Methods, *SPE Journal*, September:341–352.

[19] Hoteit, H., Firoozabadi, A. (2009), Numerical Modeling of Diffusion in Fractured Media for Gas-Injection and -Recycling Schemes, *SPE Journal*, June:323-337.

[20] Jindrová, T., Mikyška, J. (2013), Fast and Robust Algorithm for Calculation of Two-Phase Equilibria at Given Volume, Temperature, and Moles, Fluid Phase Equilibria, Vol. 353 (Sep 15, 2013), pp. 101–114.

[21] van Leer, B. (1973), Towards the ultimate conservative difference scheme I. The quest of monotonicity, *Springer Lecture Notes Phys.*, 18, 163–168.

[22] van Leer, B. (1974), Towards the ultimate conservative difference scheme II. Monotonicity and conservation combined in a second order scheme, *J. Comput. Phys.*, 14, 361–370.

[23] van Leer, B. (1977a), Towards the ultimate conservative difference scheme III. Upstream-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow, *J. Comput. Phys.*, 23, 263–275.

[24] van Leer, B. (1977b), Towards the ultimate conservative difference scheme IV. A new approch to numerical convection, *J. Comput. Phys.*, 23, 276–299.

[25] van Leer, B. (1979), Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second order sequel to Godunov's method, *J. Comput. Phys.*, 32, 101–136.

[26] Lohrenz, J., Bray, B., Clark R. (1964), Calculating viscosities of reservoir fluids from their compositions, *Journal of Petroleum Technology*, 16, 1171–1176.

[27] Michelsen, M.-L. (1982), The Isothermal Flash Problem. 1. Stability, *Fluid Phase Equilibria*, 9(1), 1–19.

[28] Michelsen, M.-L. (1982), The Isothermal Flash Problem. 2. Phase Split Calculation, *Fluid Phase Equilibria*, 9(1), 21–40.

[29] Michelsen, M.-L., Mollerup, J.-M. (2004), *Thermodynamic Models: Fundamentals and Computational Aspects*, Tie-Line Publications.

[30] Mikyška, J., Firoozabadi, A. (2010), Implementation of Higher-Order Methods for Robust and Efficient Compositional Simulation, Journal of Computational Physics, 229(8): 2898-2913.

[31] Mikyška, J., Firoozabadi, A. (2011), Application of high-resolution methods in compositional simulations, *Procedia Computer Science* 4, 928–937.

[32] Mikyška, J., Firoozabadi, A. (2011), A New Thermodynamic Function for Phase-Splitting at Constant Temperature, Moles, and Volume, AIChE Journal, 57(7):1897-1904.

[33] Mikyška, J., Firoozabadi, A. (2012), Investigation of Mixture Stability at Given Volume, Temperature, and Number of Moles, Fluid Phase Equilibria, Vol. 321 (May 15, 2012), pp. 1–9.

[34] Monteagudo, J., E., P., and Firoozabadi, A. (2007), Control-Volume Model for Simulation of Water Injection in Fractured Media: Incorporating Matrix Heterogeneity and Reservoir Wettability Effects, *SPE Journ al*, September 2007.

[35] Peaceman, D. W. (1977), *Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*, Elsevier, New York.

[36] Polívka, O., Mikyška, J. (2014), Compositional Modeling in Porous Media using Constant Volume Flash and Flux Computation without the Need for Phase Identification, Journal of Computational Physics 272: 149–169.

[37] Raviart, P., Thomas, J. (1977), *A Mixed Hybrid Finite Element Method for the Second Order Eliiptic Problem, Lect. Notes Math. Ser., vol. 606,* Springer, New York.

[38] Sammon, P., H. (1988), An Analysis of Upstream Differencing, *SPE Reservoir Engineering*, August 1988, 1053–1056.

[39] Trangenstein, J. A., Bell, J. B. (1989), Mathematical structure of compositional reservoir simulation, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 10(5), 817–845.

[40] Watts, J. W. (1986), A compositional formulation of the pressure and saturation equations, *SPE Reservoir Engineering*, 1:243–252.

[41] Younes, A., Ackerer, P., Lehmann, F. (2006), A new mass lumping scheme for the mixed hybrid finite element method, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 67:89–107.

[42] Young, L.-C., Stephenson, R. E. (1983), A Generalized Compositional Approach for Reservoir Simulation, *SPE Journal*, 23(5), 727–742.

Ing. Jiří Mikyška, Ph.D.

Datum narození:	6. června 1978
E-mail:	jiri.mikyska@fjfi.cvut.cz
Web:	http://kmlinux.fjfi.cvut.cz/~mikyska

Vzdělání:

- 2001–2005: doktorské studium na ČVUT v Praze, FJFI, obor Matematické inženýrství. Dizertační práce *Numerical Model for Simulation of Behaviour of Non-Aqueous Phase Liquids in Heterogeneous Porous Media Containing Sharp Texture Transitions*, Cena prof. Babušky za rok 2006.
- 1996–2001: magisterské studium na ČVUT v Praze, FJFI, obor Matematické inženýrství. Diplomová práce *Numerical Analysis of the Non-Stationary 2-D Porous Media Flow and Heat Transport in the Vicinity of Sources of the Geothermal Energy*, Cena Siemens za rok 2001.

Zaměstnání:

- od roku 2005: odborný asistent, ČVUT v Praze, Katedra matematiky FJFI.
- 2003–2005: asistent, ČVUT v Praze, Katedra matematiky FJFI.

Zahraniční pobyty:

- 2008-2009: Reservoir Engineering Research Institute, Palo Alto, California, USA (8 měsíců)
- Kratší pobyty:
  - 2011: Computational Transport Phenomena Laboratory, King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal, Saúdská Arábie (1 týden)
  - 2009: Yale University, Department of Chemical Engineering, New Haven, Connecticut, USA (1 týden)
  - od roku 2009: pravidelné návštěvy Reservoir Engineering Research Institute, Palo Alto, California, USA
  - 2006: Laboratoire de Mathématiques, Université Paris-Sud, Orsay, Francie (3 týdny)
  - 2004: Interdisciplinary Center for Scientific Computations, Simulation in Technology Center, University of Heidelberg, Německo (2 týdny)
  - 2002-2009: pravidelné návštěvy Colorado School of Mines, Golden, Colorado, USA.
  - 2002: superpočítačové centrum CINECA, konsorcium italských univerzit (1 měsíc), Cassalechio di Reno, Bologna, Itálie
  - od roku 2000: návštěvy Slovenské technické univerzity v Bratislavě, Slovensko.

Odborné zájmy:

- numerické metody pro řešení soustav parciálních diferenciálních rovnic popisujících transportní problémy v porézním prostředí
- termodynamika vícesložkových směsí (fázová stabilita, výpočty fázových rovnováh vícesložkových směsí, nerovnovážná termodynamika)
- propojení transportních a termodynamických modelů

Vlastní řešené projekty:

- *Computational Methods in Thermodynamics of Hydrocarbon Mixtures*, KONTAKT LH 12064, MŠMT ČR, 2012-2015,
- *Development of Computer Models of CO2 Sequestration in the Subsurface*, projekt č. 105/11/1507, GAČR, 2011-2013,
- *Mathematical Modelling of Multiphase Porous Media Flow*, projekt č. 201/08/P567, GAČR, 2008-2010,
- *Mathematical Modelling of Multiphase Flow in Porous Media*, Interní grant ČVUT č. CTU 0410714, 2004,
- *Mathematical Modelling of Groundwater Flow Contamined by Organic Compounds*, Interní grant ČVUT v Praze č. CTU 0309914, 2003.

Účast na projektech:

V letech 2001–2014 členem řešitelského týmu ve 14 projektech. Nejdůležitější jsou:

- *Applied Mathematics in Technical and Physical Sciences*, výzkumný záměr MŠMT ČR, hlavní řešitel prof. RNDr. Karel Kozel, DrSc., 2005-2012,
- *Numerical and Experimental Validation of Stochastic Upscaling for Subsurface Contamination Problems Involving Multi-Phase Volatile Organic Chlorinated Solvents*, National Science Foundation Award 0222286, hlavní řešitel Tissa H. Illangasekare, Colorado School of Mines, Golden, Colorado, 2002-2007,
- *Development and Validation of Porous Media Flow and Transport Models for Subsurface Environmental Application*, projekt KONTAKT ME878, MŠMT ČR, hlavní řešitel prof. Dr. Ing. Michal Beneš, 2006-2009,
- *Numerical Methods for Multiphase Flow and Transport in Subsurface Environmental Applications*, projekt KONTAKT ME10009, MŠMT ČR, hlavní řešitel prof. Dr. Ing. Michal Beneš, 2010-2012,
- *Jindřich Nečas Center for Mathematical Modelling*, Centrum základního výzkumu, hlavní řešitel prof. RNDr. Josef Málek, CSc., MFF UK, 2006-2012.

Publikace:

- Autor 14 publikací indexovaných na Web of Science, 6 článků v mezinárodních recenzovaných časopisech a více než 20 příspěvků v konferenčních sbornících.
- Autor skript J. Mikyška: Asymptotické metody, skripta ČVUT, 2008.
- Web of Sciece zaznamenal 57 citací, 34 bez autocitací, h-index 5 (stav k 4.1.2015 dle metodiky Web of Science).
- Recenze pro časopisy: Journal of Porous Media, Journal of Computational and Applied Mathemtatics, Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, International Journal of Mathematical Modelling and Numerical Optimisation, Journal of Math for Industry, Journal of Natural Gas Science & Engineering.

Výuka a vedení studentů:

- V současnosti vedoucí práce 1 bakalářského studenta a 2 doktorandů, dříve vedoucí 7 magisterských studentů a 1 úspěšně obhájeného doktoranda.
- Přednášející předmětů Asymptotické metody, Pokročilé partie numerické lineární algebry, Matematické modely proudění podzemních vod, Metody pro řídké matice, Vybrané partie z matematiky na Katedře matematiky FJFI. Cvičící matematické analýzy a lineární algebry pro studenty prvního ročníku FJFI.