

# Autoreferat

## 1. Anna Trykozko

### 2. Posiadane dyplomy i stopnie naukowe

1985 magister inżynier, kierunek Podstawowe Problemy Techniki, specjalność: Matematyka Stosowana, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Politechnika Warszawska.

Tytuł pracy magisterskiej: *Kollokacja w metodzie elementu brzegowego*, promotor: dr Adam Grabarski.

1997 doktor nauk technicznych w zakresie Inżynierii Środowiska. Wydział Inżynierii Środowiska, Politechnika Warszawska.

Tytuł rozprawy: *Model numeryczny izolacji hydraulicznej wysypisk odpadów*, promotor: prof. Marek Nawalany.

### 3. Dotychczasowe zatrudnienie

od 2012 Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego, Uniwersytet Warszawski, starszy specjalista naukowo-techniczny

2000 – 2012 Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego, Uniwersytet Warszawski, adiunkt

1998 – 2000 Wydział Inżynierii Środowiska, Politechnika Warszawska, adiunkt

1991 – 1997 Wydział Inżynierii Środowiska Politechnika Warszawska, asystent

1985 – 1991 Instytut Badań Systemowych Polskiej Akademii Nauk w Warszawie, asystent stażysta, asystent, starszy asystent

### 4. Wskazanie osiągnięcia naukowego wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.):

#### a) tytuł

**Wieloskalowe modelowanie ośrodków porowatych w zastosowaniach środowiskowych – skalowanie od skali porowej do regionalnej.**

#### b) autor, tytuły

[H1] W. Zijl, A. Trykozko, *Numerical Homogenization of the Absolute Permeability Using the Conformal-Nodal and Mixed-Hybrid Finite Element Method*, *Transport in Porous Media* 44 (2001), 33–62.

[H2] A. Trykozko, W. Zijl, A. Bossavit, *Nodal and mixed finite elements for the numerical homogenization of 3D permeability*, *Computational Geosciences* 5 (2001), 61–84.

[H3] W. Zijl, A. Trykozko, *Numerical homogenization of the absolute permeability tensor around a well*, *SPJ Journal*, (December 2001), 399–408.

[H4] A. Trykozko, G. Brouwer, W. Zijl, *Downscaling: a complement to homogenization*, International Journal of Numerical Analysis and Modeling, Vol. 5, Supp, (2008), 157–170.

[H5] M. Peszyńska, A. Trykozko, *Convergence and stability in upscaling of flow with inertia from pore scale to meso scale*, International Journal for Multiscale Computational Engineering, Vol. 9, Nr 2, (2011), 215–229.

[H6] M. Peszyńska, A. Trykozko, *Pore-to-core simulations of flow with large velocities using continuum models and imaging data*, Computational Geosciences, Vol. 17, nr 4, (2013), 623–645.

[H7] A. Trykozko, M. Peszyńska, *Pore-scale simulations of pore clogging and upscaling with large velocities*, GAKUTO International Series, Mathematical Sciences and Applications, Vol. 36 (2013), 277–300.

**c) Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania.**

## **1. Wprowadzenie - zarys tematyki badawczej**

Ośrodki porowate stanowią przedmiot zainteresowania wielu różnych dziedzin nauki i techniki. Kontekstem prezentowanych przeze mnie prac, stanowiących podstawę procedury habilitacyjnej, są zastosowania należące do obszaru inżynierii środowiska i dotyczące modelowania procesów zachodzących w złożach podziemnych.

Istotnym wyróżnikiem ośrodków porowatych jest ich wieloskalowość, a użyteczność konkretnych modeli zależy od skali, w jakiej rozpatrywane jest zjawisko. Wyznaczanie parametrów modeli opisujących przepływ przez ośrodki porowate w skali adekwatnej do modelowanych zjawisk oraz ustalanie relacji międzyskalowych ma podstawowe znaczenie dla powodzenia procesu modelowania i stanowi główny wątek prac prezentowanych w ramach tego autoreferatu.

Wszystkie omawiane tu artykuły [H1]–[H7] są poświęcone zagadnieniom skalowania ośrodków porowatych. Z uwagi na skalę przestrzenną zagadnień jakich dotyczą, dzielą się na dwie grupy. Opisane w Części 3 prace [H1], [H2], [H3] oraz [H4] obejmują zagadnienia związane z ośrodkami porowatymi opisywanymi jako *continuum*. [H1], [H2] i [H3] dotyczą skalowania ze skali laboratoryjnej do skali większej (regionalnej), natomiast [H4] podejmuje zagadnienie identyfikacji parametrów modelu w drobnej skali na podstawie informacji związanych z większą skalą przestrzenną.

W pracach [H5], [H6] i [H7] ośrodki porowate są rozważane na poziomie skali mikroskopowej i na tej podstawie wyznaczane są parametry charakteryzujące przepływ w skali *continuum*; opis znajduje się w Części 4.

Omówienie uzyskanych wyników zostanie poprzedzone wprowadzeniem obejmującym opis modeli matematycznych przepływu w ośrodkach porowatych oraz metod skalowania (Część 2). Moim zamierzeniem w odniesieniu do tego Autoreferatu jest spójne przedstawienie wyników prac [H1]–[H7] oraz umiejscowienie ich w jednolitym kontekście.

Pewną trudnością jest brak ścisłej polskiej terminologii i dlatego, aby uniknąć nieporozumień, w niektórych przypadkach podawane są również angielskie określenia.

## 2. Modele matematyczne przepływu

**Ośrodki porowate.** Złożona struktura ośrodków porowatych sprawia, że sposób ich postrzegania i opisu zależy od skali przestrzennej, w jakiej są rozpatrywane. W kontekście prezentowanych prac wyróżnia się trzy skale przestrzenne.

Skala najdrobniejsza, określana jako skala porowa lub mikroskala, to skala, w której w strukturze próbki ośrodka porowatego o objętości  $\Omega$  wyróżnia się stały szkielet  $\Omega_S$  i przestrzeń porową  $\Omega_F$ , w której następuje przepływ.  $\Omega = \Omega_S \cup \Omega_F \cup \Gamma$ , gdzie  $\Gamma = \Omega_S \cap \Omega_F$  oznacza granicę między stałym szkieletem i przestrzenią porową. Cechą charakterystyczną ośrodków porowatych jest duże pole powierzchni porowej  $\Gamma$  oraz wąskie połączenia między przestrzeniami porowymi [2]. Parametrem charakteryzującym ośrodek porowaty mający odniesienie do tej skali jest *porowatość*  $\phi$  określana jako stosunek objętości  $\Omega_F$  do objętości próbki  $\Omega$ . Na ogół przyjmuje się, że wielkość obszarów rozważanych w skali porowej nie przekracza  $10^{-2}$  m; to ograniczenie zależy od rodzaju ośrodka porowatego, jego morfologii oraz rodzaju materiału.

Reprezentacja ośrodka w skali porowej nie jest adekwatna w modelowaniu przepływu i transportu w obszarach o rozmiarach wymaganych w zastosowaniach związanych z przepływami w złożach podziemnych. Na potrzeby modelowania obejmującego większe obszary stosuje się podejście skali makroskopowej [13], w której układ faza stała  $\Omega_S$  – przestrzeń porowa  $\Omega_F$  zastępuje się koncepcją *continuum*  $\Omega$ . Najważniejszym parametrem charakteryzującym ośrodek porowaty w każdym punkcie  $\Omega$  jest *przepuszczalność*  $\mathbf{k}$  [ $\text{m}^2$ ]. Przepuszczalność jest właściwością ośrodka stanowiąc efektywną reprezentację cech geometrycznych struktury opisanej w mikroskali poprzez  $\Omega_S$  i  $\Omega_F$ . W koncepcji makroskopowego *continuum* ważnym pojęciem jest *Reprezentatywna Elementarna Objętość* oznaczana jako REV (ang. *Representative Elementary Volume*) [2, 13]. REV powinna być jednocześnie odpowiednio duża, aby poprawnie reprezentować cechy próbki, i odpowiednio mała w stosunku do rozmiarów rozważanego wycinka objętości ośrodka.

W zależności od rozmiarów geometrycznych, dla potrzeb modelowania skalę makroskopową dzieli się na kategorie. W prezentowanych pracach wyróżnia się skalę laboratoryjną (mezoskalę), odpowiadającą obszarom o rozmiarach rzędu 1 metra, oraz skalę regionalną (makroskalę) obejmującą obszary o rozmiarach rzędu setek metrów, lub kilometrów.

Zmiennymi charakteryzującymi przepływ w ośrodku porowatym jest ciśnienie  $p$  [Pa] oraz prędkość  $\mathbf{v}$  [m/s]. W przedstawianych pracach rozważane są ośrodki i płyny nieściśliwe oraz zakłada się przepływ w stanie ustalonym.

Przepływ rozpatrywany w skali mikro zachodzi tylko w przestrzeni porowej  $\Omega_F$ , a zależność ciśnienia  $p$  i prędkości  $\mathbf{v}$  jest opisana za pomocą układu równań Naviera-Stokesa: równania pędu

$$\rho \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{v}(\mathbf{x}) - \mu \nabla^2 \mathbf{v}(\mathbf{x}) = -\nabla p(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega_F, \quad (1)$$

oraz równania ciągłości

$$\nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega_F. \quad (2)$$

W równaniu (1)  $\rho$  [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ] gęstość płynu,  $\mu$  [ $\text{Pa} \cdot \text{s}$ ] – lepkość kinematyczna, dla uproszczenia pominięto siły objętościowe i grawitację. Ponadto  $\mathbf{x}$  oznacza punkt w przestrzeni,  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$  dla obszarów dwuwymiarowych,  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  w przypadku obszarów trójwymiarowych.

W skali makroskopowej matematyczny opis przepływu w obszarze  $\Omega$  obejmuje równanie pędu

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = -\frac{\mathbf{k}(\mathbf{x})}{\mu} \nabla p(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3)$$

oraz równanie ciągłości

$$\nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (4)$$

Równanie (3) wyraża prawo Darcy [2]. Zmienna  $\mathbf{q}$  [m/s] oznacza prędkość filtracji, jest też określana jako strumień objętościowy,  $\mathbf{k}$  [m<sup>2</sup>] reprezentuje przepuszczalność ośrodka. Przy założeniu małych prędkości przepływu, prawo Darcy można formalnie wyprowadzić z równań Naviera-Stokesa (1), stosując metodę homogenizacji [4, 19].

W zastosowaniach hydrogeologicznych w miejsce ciśnienia wprowadza się wysokość hydrauliczną  $h$  [m]. Wtedy prawo Darcy (3) przyjmuje postać

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = -\mathbf{k}_f(\mathbf{x})\nabla h(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (5)$$

$\mathbf{k}_f$  [m/s] oznacza współczynnik filtracji,  $\mathbf{k}_f = \mathbf{k} \frac{\rho g}{\mu}$ . Współczynnik filtracji zależy od przepuszczalności ośrodka  $\mathbf{k}$  oraz parametrów płynu  $\rho$  i  $\mu$ . W dalszym ciągu, dla uproszczenia zapisu, lepkość  $\mu$  w równaniach będzie pominięta, zakładając  $\mu = 1$ .

W omawianych pracach w zależności od kontekstu prędkość jest oznaczana jako  $\mathbf{v}$  lub  $\mathbf{q}$ .

Połączenie równań (3) i (4) prowadzi do równania przepływu w stanie ustalonym

$$-\nabla \cdot (\mathbf{k}(\mathbf{x})\nabla p(\mathbf{x})) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (6)$$

W ośrodkach niejednorodnych przepuszczalność  $\mathbf{k}$  zależy od położenia w  $\Omega$ ,  $\mathbf{k} = \mathbf{k}(\mathbf{x})$ , ponadto w ogólnym przypadku  $\mathbf{k}$  jest tensorem opisującym anizotropowe cechy ośrodka. W przypadku trójwymiarowym tensor jest reprezentowany za pomocą macierzy  $3 \times 3$ :

$$\mathbf{k} = \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Dla jednoznacznego rozwiązania równania (6) niezbędne jest nałożenie warunków brzegowych. Poza pewnymi szczególnymi przypadkami takie rozwiązanie można wyznaczyć tylko w sposób przybliżony stosując metody numeryczne.

**Modele nieliniowe.** Zakres stosowalności prawa Darcy jest ograniczony do pewnego zakresu prędkości przepływu. Za górny zakres jego stosowalności przyjmuje się liczbę Reynoldsa  $Re = \frac{|\mathbf{v}|\delta}{\mu}$  równą  $1 \div 10$  [2, 3, 9],  $\delta$  – charakterystyczna długość w obszarze przepływu, która w szczególności w ujęciu mikroskopowym może reprezentować średnicę ziarna. Przyczyną odstępstwa od modelu Darcy jest wzrastający w miarę zwiększania się prędkości udział sił bezwładnościowych, co wymaga stosowania do opisu modeli nieliniowych ([2], [H5], [H6]).

Naturalne przepływy spotykane w zastosowaniach hydrogeologicznych zazwyczaj należą do zakresu stosowalności prawa Darcy, jednak w przypadku pewnych zastosowań, na przykład modelowania przepływu w sąsiedztwie studni, procesów remediacji lub szczelinowania hydraulicznego należy uwzględnić również występowanie większych prędkości.

Historycznie najstarsze rozszerzenie w postaci równania Forchheimera [3] uzupełnia prawo Darcy  $\mathbf{v} = -\mathbf{k}\nabla p$  o składnik  $\beta |\mathbf{v}| \mathbf{v}$

$$\beta |\mathbf{v}| \mathbf{v} + \mathbf{v} = (1 + \beta |\mathbf{v}|)\mathbf{v} = -\mathbf{k}\nabla p, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (8)$$

Model (8) wykorzystuje dwa parametry  $(\mathbf{k}, \beta)$ , współczynnik  $\beta$  reprezentuje efekty bezwładnościowe. Przyjmuje się, że  $\mathbf{k}$  oraz  $\beta$  zależą tylko od mikroskopowej struktury ośrodka porowatego.

Model (8) może zostać dodatkowo rozszerzony poprzez dodanie korekty potęgowej  $\alpha \neq 1$  [3]

$$(1 + \beta |\mathbf{v}|^\alpha) \mathbf{v} = -\mathbf{k} \nabla p, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (9)$$

z  $1 \leq \alpha \leq 3$ .

Naturalną konsekwencją anizotropowego charakteru ośrodka jest założenie w równaniu (8) tensorowej formy parametrów  $\beta$  i  $\mathbf{K}$  [3]

$$\sum_{j=1}^3 \beta_{ij} |\mathbf{v}|^\alpha v_i + v_i = - \sum_{j=1}^3 \mathbf{k}_{ij} \frac{\partial p}{\partial x_j}, \quad i = 1, \dots, 3, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (10)$$

Pomimo intensywnych badań, w szczególności wykorzystujących rygorystyczne matematyczne techniki skalowania i homogenizacji, nie ma uniwersalnego modelu opisującego przepływ przy dużych prędkościach ([8] oraz referencje w [H5]). Wykorzystanie komputerowych symulacji przepływów w skali porowej wnosi nowe aspekty do tej dyskusji, co zostanie omówione w Części 4.

**Skalowanie.** Metodą umożliwiającą określenie relacji pomiędzy różnymi skalami przestrzennymi opisu zjawiska jest skalowanie. Skalowanie w kontekście ośrodków porowatych najczęściej łączy dwie skale: skalę o wyższej rozdzielczości, która będzie określana jako *drobna* skala (ang. *fine scale*), oraz *dużą* skalę o niższej rozdzielczości (ang. *coarse scale*). W dalszym ciągu zmienne występujące w drobnej skali będą oznaczane za pomocą małych liter, a w skali dużej za pomocą wielkich liter.

Potrzeba skalowania wynika z ograniczeń wielkości modeli, możliwości percepcji oraz możliwości prowadzenia pomiarów fizycznych i doświadczalnego weryfikowania hipotez [13]. W przypadku obliczeń numerycznych miarą wielkości modeli jest liczba komórek dyskretyzacji obszaru, a ich granice są narzucone przez dostępne moce komputerowe oraz realistyczne czasy prowadzenia symulacji. Innym powodem skalowania w zastosowaniach hydrogeologicznych jest rozdźwięk między rozmiarami obszarów podlegających modelowaniu a rozdzielczością dostępnych danych (pomiarowych, geostatystycznych, mikroobrazowych).

Elementy procesu skalowania w ujęciu omawianych prac to:

- Dane definiujące zagadnienie w drobnej skali obejmujące: (i) równanie przepływu (6) lub równania Naviera-Stokesa (1)-(2), (ii) geometrię obszaru  $\Omega$  lub  $\Omega_F$ , (iii) parametry płynu, (iv) warunki brzegowe.
- Model numeryczny, w tym (i) siatka obliczeniowa, oraz (ii) kod numeryczny.
- Wyniki symulacji – rozwiązanie równania przepływu w drobnej skali.
- Wyznaczenie parametrów dużej skali oraz w miarę potrzeby innych zależności na podstawie uśrednionych zmiennych modelu w drobnej skali.

Relacje międzyskalowe występują zarówno podczas skalowania ze skali laboratoryjnej do skali regionalnej (prace [H1], [H2] i [H3]), jak i ze skali mikroskopowej do skali laboratoryjnej (prace [H5], [H6] i [H7]). Skalowanie ze skali dużej do skali drobnej [H4] stanowi odrębne zagadnienie.

**Uśrednianie.** Do przejścia do skali większej wykorzystuje się uśrednione wartości zmiennych modeli w drobnej skali. W omawianych pracach wykorzystywano uśrednianie objętościowe. Średnia wartość  $F$  funkcji  $f$  w obszarze  $\Omega_V$  wyraża się wzorem:

$$F = \langle f \rangle_V = \frac{\sum_{i=1}^n f_i v_i}{V}. \quad (11)$$

Typowo zakłada się, że wartości uśrednianej funkcji  $f_i$  są wyznaczone numerycznie, a zatem są powiązane z dyskretyzacją obszaru. Indeks  $i$  odnosi się do elementów dyskretyzacji,  $i = 1, \dots, n$ ,  $v_i$  oznacza objętość elementu  $i$ , a  $V$  objętość  $\Omega_V$ .

W kolejnych częściach przedstawione są wyniki związane ze skalowaniem ze skali laboratoryjnej do skali makro oraz z mikroskali do skali laboratoryjnej.

### 3. Skalowanie ze skali laboratoryjnej do skali makro - wyznaczenie efektywnego współczynnika przepuszczalności metodą numerycznej homogenizacji

W tej części prezentowane są główne wyniki prac [H1–H3]. Skalowanie ze skali laboratoryjnej do skali makro ma na celu zastąpienie obszaru charakteryzowanego niejednorodnym rozkładem przepuszczalności  $\mathbf{k}(\mathbf{x})$  przez jednorodny obszar o efektywnej przepuszczalności  $\mathbf{K}$ .

Ośrodek porowaty w obu skalach jest rozważany jako *continuum*; zakłada się, że w obu skalach obowiązuje prawo Darcy (3). Matematyczny opis przepływu w skali laboratoryjnej i regionalnej wykorzystuje takie same równania, a różnica występuje w wartościach parametrów, co wynika z innej rozdzielczości modeli. Z punktu widzenia komputerowych symulacji miarą rozdzielczości modeli są rozmiary komórek obliczeniowych. Jest to spowodowane (i) wykorzystaniem metod numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych, konstruowanych (w większości przypadków) w oparciu o dyskretyzację obszaru obliczeniowego, oraz (ii) wymaganiami stosowania stałych wartości parametrów w obrębie jednej komórki obliczeniowej.

W przypadku skalowania ze skali laboratoryjnej do skali regionalnej obszarowi obejmującemu pewną liczbę komórek obliczeniowych w skali laboratoryjnej odpowiada tylko jedna komórka w skali makro, w związku z tym niejednorodna informacja musi zostać wyrażona przez jeden efektywny parametr.

Zagadnieniu skalowania, rozumianego jako wyznaczenie parametrów efektywnych, poświęcono wiele prac [6, 18]. Jest to technika wciąż rozwijana i szeroko stosowana, nie tylko w dziedzinie inżynierii środowiska. W najprostszym przypadku za wartość efektywną parametru można przyjąć średnią arytmetyczną  $\mu_a$  lub harmoniczną  $\mu_h$  z przepuszczalności występujących w komórkach obszaru w drobnej skali; obowiązuje oszacowanie Wienera  $\mu_h \leq K \leq \mu_a$  [18]. Słabością podejścia wykorzystującego takie średnie jest zaniedbanie przestrzennego charakteru rozkładu przepuszczalności w skali drobnej, mającego wpływ zarówno na wartość efektywną przepuszczalności (w zależności od występowania, bądź nie, ścieżek preferowanego przepływu) jak i występowanie efektów anizotropowych, będących efektem niejednorodności w drobnej skali.

Podstawę wykorzystanego podejścia stanowi 'zasada zachowania sformułowania' stwierdzająca, że wyrażony w drobnej skali wpływ i wypływ do danej objętości powinien być zachowany w dużej skali. Jest to wyrażone równaniem:

$$\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla P(\mathbf{x})) = \nabla \cdot (\mathbf{k}(\mathbf{x}) \nabla p(\mathbf{x})), \quad (12)$$

gdzie  $\mathbf{K}$  efektywny współczynnik przepuszczalności (stały),  $P(\mathbf{x})$  ciśnienie w dużej skali.

Prezentowane podejście do skalowania można sklasyfikować jako 'niezależne od procesu', co oznacza, że efektywna przepuszczalność nie powinna być powiązana z konkretnymi warunkami zewnętrznymi i może być wykorzystana w symulacjach dla różnych scenariuszy przepływu.

W [H1] zostały zdefiniowane trzy postulaty, jakie powinna spełniać procedura skalowania. Są to:

- Zachowanie siły wymuszającej  $\mathbf{e} = \nabla p$ ;
- Zachowanie równania ciągłości: składowe przeskalowanego strumienia objętościowego  $Q_i$  powinny być równe uśrednionym składowym strumienia  $q_i$ ;
- Zachowanie rozpraszania: rozpraszanie  $\Phi$  w skali większej powinno być równe uśrednionemu rozpraszaniu  $\phi = -\nabla p \cdot \mathbf{q}$  zachodzącemu w drobnej skali.

Z powyższych postulatów otrzymuje się trzy zależności prowadzące do wyznaczenia  $\mathbf{K}$  [H1]:

$$\langle q_i \rangle_V = \mathbf{K} \cdot \langle e_i \rangle_V, \quad i = 1, \dots, 3. \quad (13)$$

$$\langle e_i \rangle_V \cdot \mathbf{K} \cdot \langle e_j \rangle_V = \langle e_i \cdot q_j \rangle_V, \quad i, j = 1, \dots, 3. \quad (14)$$

$$\langle q_j \rangle_V \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \langle q_i \rangle_V = \langle e_i \cdot q_j \rangle_V, \quad i, j = 1, \dots, 3. \quad (15)$$

Przepuszczalności  $\mathbf{K}$  otrzymane na podstawie zależności (13)–(15) są wzajemnie powiązane ([H1]), ale charakteryzują się różnymi właściwościami. A zatem zadanie wyznaczenia parametrów efektywnych nie ma jednoznacznego rozwiązania. Kolejne przyczyny braku jednoznaczności to oddziaływanie warunków brzegowych na rozwiązanie zagadnienia przepływu w drobnej skali oraz błędy wynikające aproksymacji numerycznych.

Dobór warunków brzegowych dla potrzeb skalowania był omawiany w wielu pracach [18, 6]. Aby zminimalizować ich wpływ na efektywne parametry, równanie przepływu powinno rozwiązywać się w obszarze  $\Omega$  odpowiednio większym od obszaru  $\Omega_V$ , w którym przeprowadza się uśrednianie.

Przyjęcie założenia o okresowym, cyklicznie powielanym wzorcu niejednorodności ośrodka w drobnej skali, uzasadnia wykorzystanie okresowych warunków brzegowych. Można wtedy ograniczyć skalowany obszar tylko do jednej komórki okresowości reprezentującej wzorzec niejednorodności oraz wykorzystać metodę homogenizacji [4, 19]. Skalowanie ośrodków o okresowej strukturze jest ściśle matematycznie uzasadnione [4, 19]. W omawianych pracach [H1], [H2], [H3] wykorzystano podejście intuicyjne kładąc nacisk na fizyczny punkt widzenia. Z (12), dla stałego  $\mathbf{K}$  oraz liniowego  $P(\mathbf{x})$  (na mocy homogenizacji i rozważań w [H1]) w komórce okresowości zachodzi

$$\nabla \cdot (\mathbf{k}(\mathbf{x}) \nabla p(\mathbf{x})) = 0. \quad (16)$$

**Wyznaczenie tensora przepuszczalności  $\mathbf{K}$ .** Efektywny współczynnik przepuszczalności  $\mathbf{K}$  jest reprezentowany przez tensor, którego elementy można wyznaczyć z równań (13), (14) lub (15). W przypadku trójwymiarowym, aby uzyskać 9 równań niezbędnych do wyznaczenia wszystkich składowych tensora, konieczne jest trzykrotne rozwiązanie zagadnienia w drobnej skali dla trzech różnych liniowo niezależnych zestawów warunków brzegowych. W praktyce najczęściej zadaje się przepływ w kierunkach zgodnych z osiami układu współrzędnych.

W przypadku ośrodka okresowego, wyznaczone z równań (13) i (14) przepuszczalności są zbliżone, a ewentualne (małe) różnice w ich wartościach wynikają z błędów zaokrągleń numerycznych. W przypadku zaburzenia okresowości dwie metody uśrednienia prowadzą do różnych wyników [H1], [H2], przy czym różnice są nieznaczące.

Z obliczeniowego punktu widzenia homogenizacja jest najwygodniejszą i najtańszą obliczeniowo metodą skalowania. Należy jednak podkreślić, że założenie o okresowości ośrodka może być w praktyce nierealistyczne. Dlatego w pracach [H2] i [H3] eksperymentalnie badano wpływ zaburzeń okresowości ośrodka na wartości efektywnej przepuszczalności. Ogólny wniosek jest taki, że w przypadku ośrodków o strukturze nieokresowej, homogenizacja może być uznana za zadowalające przybliżenie.

### 3.1. Metoda elementu skończonego

Poza wąską klasą szczególnych przypadków rozwiązanie równania przepływu można wyznaczyć tylko w sposób przybliżony stosując metody numeryczne.

Kluczową koncepcją prac [H1], [H2] i [H3] było wykorzystanie metody elementu skończonego (MES) w dwóch sformułowaniach: standardowym konforemno-węzłowym (*Conformal-Nodal* – CN) [12] oraz mieszano-hybrydowym (*Mixed-Hybrid* – MH) [10, 17], w oparciu o własne implementacje algorytmów i stworzone na ich podstawie oprogramowanie.

**Sformułowanie standardowe MES.** Metoda elementu skończonego wykorzystuje (i) słabe sformułowanie rozwiązywanego zagadnienia różniczkowego cząstkowego [12], (ii) skończone wymiarowe przestrzenie konstruowane w oparciu o podział  $h$  obszaru obliczeniowego na elementy, (iii) funkcje bazowe - wielomiany zdefiniowane na elementach.

Rozwiązania przybliżonego  $p_h$  zagadnienia (6) poszukuje się w postaci kombinacji liniowej

$$p_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i(\mathbf{x}), \quad (17)$$

gdzie  $\phi_i(\mathbf{x})$  oznacza funkcje bazowe związane z węzłem  $i$ , natomiast  $\alpha_i$  to poszukiwane współczynniki równe wartościom funkcji  $p_h$  w węzłach  $i$ . Indeks  $h$  w funkcji  $p_h$  ma na celu zaznaczenie związku przybliżonego rozwiązania równania z dyskretyzacją  $h$ . W opisywanych obliczeniach przyjęto liniowe funkcje bazowe.

Po podstawieniu reprezentacji (17) do słabego sformułowania równania (6), w którym jako funkcje testowe wykorzystuje się funkcje bazowe  $\phi_i$  (co jest cechą charakterystyczną metody Galerkin), otrzymuje się układ  $n$  równań liniowych z niewiadomymi  $\alpha_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Liczba niewiadomych  $n$  jest równa liczbie węzłów dyskretyzacji (z dokładnością do węzłów brzegowych, które wchodzi w skład niewiadomych w zależności od warunków brzegowych).

W równaniach przepływu (6) poszukiwaną funkcją jest ciśnienie  $p$ . Jednak w zastosowaniach hydroinżynierskich równie duże znaczenie ma prędkość filtracji  $\mathbf{q}$ , wyznaczana *á posteriori* na podstawie numerycznie wyznaczonych wartości  $p_h$  i prawa Darcy (3). Ze względu na kawałkami liniową reprezentację  $p_h(\mathbf{x})$ , aproksymacja gradientu  $\nabla p_h(\mathbf{x})$ , a co za tym idzie, również prędkości filtracji  $\mathbf{q}_h$ , jest stała na poszczególnych elementach. Oznacza to, że prawo zachowania masy (4) nie jest spełnione na poziomie dyskretnym. Wykorzystane jako kompletarne podejście sformułowanie mieszano-hybrydowe [10, 17] nie posiada tej wady.



**Sformułowanie mieszane.** Metoda mieszana elementu skończonego wykorzystuje zagadnienie (6) przekształcone do układu równań

$$\begin{cases} \mathbf{k}(\mathbf{x})^{-1} \mathbf{q}_h(\mathbf{x}) + \nabla p_h(\mathbf{x}) = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{q}_h(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{cases} \quad (18)$$

z odpowiednimi warunkami brzegowymi. W sformułowaniu mieszanym aproksymacje funkcji  $p_h(\mathbf{x})$  i  $\mathbf{q}_h(x)$  konstruuje się niezależnie. Procedura przebiega analogicznie do standardowej metody elementu skończonego: równania (18) zastępuje się ich słabymi sformułowaniami, a rozwiązań przybliżonych poszukuje się w postaci

$$\mathbf{q}_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \alpha_i \boldsymbol{\psi}_i(\mathbf{x}) \text{ oraz } u_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \beta_i \phi_i(\mathbf{x}). \quad (19)$$

Funkcje  $\mathbf{q}_h(\mathbf{x})$  oraz  $\boldsymbol{\psi}_i(\mathbf{x})$  są funkcjami wektorowymi, ze stopniami swobody związanymi z krawędziami (przypadek 2D) lub ściankami (3D) elementów. Funkcje  $u_h(\mathbf{x})$  i  $\phi_i(\mathbf{x})$  są funkcjami skalarnymi i są stałe na elementach. Wynikowy układ równań ma wymiar równy  $n + m$ ,  $n$  liczba elementów i  $m$  liczba krawędzi (2D) lub ścianek (3D) (z dokładnością do warunków brzegowych). Zaletą tego sformułowania jest spełnienie równania ciągłości również na poziomie dyskretnym.

Z przyczyn praktycznych (duży rozmiar oraz złe uwarunkowanie macierzy układu) zagadnienie mieszane przekształca się do postaci mieszano-hybrydowej [10], [H2]. W tym sformułowaniu wynikowy układ równań ma wymiar  $m$  równy liczbie krawędzi/ścianek, a część obliczeń przeprowadza się lokalnie w obrębie poszczególnych elementów. Implementacja metody mieszano-hybrydowej jest bardziej złożona od standardowej wersji MES. Dziesięciokrotnie większa liczba niewiadomych w układzie równań powoduje odpowiednio większy koszt obliczeniowy [H1], [H2]. Jednak dzięki zastosowaniu metody mieszano-hybrydowej uzyskuje się lepszą jakościowo aproksymację pola prędkości oraz istotne w kontekście obliczeniowym cechy skalowanych parametrów.

**Aspekty obliczeniowe.** Z uwagi na fakt, że w zdecydowanej większości przypadków w procesie skalowania wykorzystuje się numeryczne rozwiązania równań opisujących proces w drobnej skali, istotne znaczenie ma badanie wpływu błędów aproksymacji na jakość wyznaczonych efektywnych parametrów. W szczególności w procesie skalowania ze skali laboratoryjnej do skali regionalnej na wynik mają wpływ następujące czynniki:

- różne metody numeryczne zastosowane do rozwiązania równań w drobnej skali oraz dyskretyzacja obszaru obliczeniowego, w tym zagęszczanie siatki w wybranych podobszarach [H1];
- różne warunki brzegowe oraz dodatkowe założenia, na przykład o okresowości ośrodka;
- wyznaczenie tensora przepuszczalności  $\mathbf{K}$  na podstawie zależności (13), (14), lub (15).

Zastosowanie w obliczeniach dwóch różnych komplementarnych sformułowań metody elementu skończonego pozwala bezpośrednio określać błąd aproksymacji. W szczególności w [H1] uzyskano następujące oszacowania:

- Wartość sumy elementów z przekątnej tensora przepuszczalności  $\mathbf{K}^{CN}$  otrzymanego na podstawie metody standardowej CN jest zawsze większa bądź równa sumie diagonalnych elementów dokładnej przepuszczalności  $\mathbf{K}$ .

- Wartość sumy elementów z przekątnej tensora przepuszczalności  $\mathbf{K}^{MH}$  otrzymanego na podstawie metody mieszano-hybrydową MH jest zawsze mniejsza bądź równa sumie diagonalnych elementów dokładnej przepuszczalności  $\mathbf{K}$ .

Podsumowuje to zależność

$$\mathbf{K}_{xx}^{MH} + \mathbf{K}_{yy}^{MH} + \mathbf{K}_{zz}^{MH} \leq \mathbf{K}_{xx} + \mathbf{K}_{yy} + \mathbf{K}_{zz} \leq \mathbf{K}_{xx}^{CN} + \mathbf{K}_{yy}^{CN} + \mathbf{K}_{zz}^{CN}. \quad (20)$$

Odległość między górnym i dolnym oszacowaniem pozwala ocenić jakość numerycznego rozwiązania oraz wpływ siatki obliczeniowej na rozwiązanie, w tym pokazać korzyści wynikające z nierównomiernego zagęszczania dyskretyzacji [H1].

W [H2] przeprowadzono formalny dowód własności metody, uzyskując oszacowania dla wartości własnych macierzy  $\mathbf{K}^{CN}$  i  $\mathbf{K}^{MH}$ ,

$$\Lambda_{ii}^{MH} \leq \Lambda_{ii} \leq \Lambda_{ii}^{CN}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (21)$$

**Skalowanie wokół studni.** Omówione metody skalowania można rozszerzyć na przypadek skalowania w obszarach nieprostokątnych, co w szczególności znajduje zastosowanie do wyznaczania efektywnych parametrów w obszarach wokół studni, [H2], [H3]. W takim ujęciu współczynnik efektywny wyznacza się dla obszaru o cylindrycznym kształcie.

Poprzez zamianę zmiennych do współrzędnych cylindrycznych  $r, \phi, z$ , obszar obliczeniowy transformuje się na obszar o kształcie prostokątnym. W wyniku zmiany zmiennych przekształceniu ulegają również oryginalne przepuszczalności w drobnej skali  $\mathbf{k}$ . Przepuszczalność  $\tilde{\mathbf{k}}$  w przetransformowanym układzie współrzędnych ma cechy anizotropowe:  $\tilde{k}_{rr} = \tilde{k}_{zz} = r\mathbf{k}$ ,  $\tilde{k}_{\phi\phi} = \mathbf{k}/r$ ; w ten sposób procedura skalowania w obszarach wokół studni nadaje większą wagę przepuszczalnościom w obszarach znajdującym się bliżej studni.

W porównaniu z wcześniej omówioną procedurą skalowania w obszarach prostokątnych, występują istotne różnice:

- Homogenizacja przeprowadzona na przetransformowanej komórce okresowości pozwala uzyskać jednorodną efektywną przepuszczalność w dużej skali  $\mathbf{K}_{Trans}$ . Jest to jednak parametr powiązany z przetransformowanym obszarem prostokątnym, a nie z oryginalnym cylindrycznym obszarem.
- Dlatego rozwiązuje się dodatkowe zagadnienie, polegające na znalezieniu jednorodnej przepuszczalności  $\mathbf{k}^*$  (w oryginalnym obszarze) takiej, aby po transformacji obszaru i wykonaniu procedury skalowania uzyskać wartość efektywną równą również  $\mathbf{K}_{Trans}$ . Jest to zagadnienie nieliniowe.
- Za wartość efektywną w obszarze cylindrycznym przyjmuje się  $\mathbf{k}^*$ .

Należy też zwrócić uwagę na fakt, że ze względu na cylindryczny oryginalny kształt oraz transformację nie jest spełniony warunek okresowości leżący u podstaw metody homogenizacji. To zagadnienie zostało przeanalizowane w [H3].

### 3.2. Zagadnienie odwrotne: skalowanie ze skali makro do skali laboratoryjnej

Wobec częstego niedoboru danych pomiarowych, przy równoczesnej konieczności określania parametrów na potrzeby modelowania, rekonstrukcja parametrów ośrodka porowatego, w szczególności przepuszczalności, stanowi ważne zadanie w praktyce inżynierskiej. Jest to zadanie należące do klasy zagadnień odwrotnych i jako takie jest nie tylko źle uwarunkowane numerycznie, ale źle postawione matematycznie.

W ujęciu [H4] zadanie rekonstrukcji zostało zdefiniowane jako wyznaczenie rozkładu przepuszczalności drobnej skali na podstawie rozwiązania równania przepływu w dużej skali, przy czym jednorazowo rekonstrukcja dotyczy obszaru jednej komórki dużej skali. W ten sposób rekonstrukcji nadaje się interpretację skalowania w dół (ang. *downscaling*), a [H4] stanowi spójne uzupełnienie tematyki skalowania opisaney w poprzedniej części. Tak postawione zadanie może być uzasadnione potrzebą przeprowadzenia lokalnych obliczeń z rozdzielczością niedostępną podczas rozważania przepływu w całym obszarze.

Kluczem do przeprowadzenia procedury rekonstrukcji jest możliwość jednoczesnego zdefiniowania dwóch zestawów warunków brzegowych na całym brzegu odtwarzanej komórki dużej skali. Warunki brzegowe dla takiej komórki pochodzą z rozwiązania zagadnienia przepływu w dużej skali i są takie, że: (i) całkowity wpływ przez brzegi rekonstruowanego obszaru (widzianego w drobnej skali) jest równy wpływowi do tego samego obszaru wyznaczonemu dla modelu dużej skali, (ii) uśrednione ciśnienie na każdym elemencie brzegu obszaru powinno być równe średniemu ciśnieniu wyznaczonemu dla modelu dużej skali.

Procedura definiuje iteracyjny schemat modyfikowania rekonstruowanych przepuszczalności. Potrzebny do zainicjowania obliczeń początkowy rozkład niejednorodności może pochodzić z wiedzy sprzed skalowania, zostać wygenerowany zgodnie z zadanym rozkładem statystycznym [20] lub wynikać z dowolnych założeń odnośnie wzorca niejednorodności. Iteracje prowadzi się do momentu uzyskania zgodnych (z dokładnością do zadanego kryterium zatrzymania) rozwiązań dla obu warunków brzegowych.

W [H4] zaproponowano zastosowanie metody Podwójnych Ograniczeń (ang. *Double Constraints Method*), a w implementacji wykorzystano wywodzącą się z dziedziny obrazowania medycznego metodę EIT (ang. *Electric Impedance Tomography*). Zaletą metody podwójnych ograniczeń jest łatwość implementacji: można zaadaptować dowolny solver równania przepływu poprzez dodanie pętli zewnętrznej. W obliczeniach wykorzystywano własne oprogramowanie.

Przykłady wykorzystania metody oraz dyskusja znajdują się w [H4] i [20].

Zaprezentowane zagadnienie nie ma jednoznacznego rozwiązania, mimo to zaproponowana procedura może być zastosowana jako praktyczne podejście inżynierskie.

**Podsumowanie.** Główne osiągnięcia prac [H1], [H2], [H3] i [H4] obejmują:

- Uzyskanie oszacowania górnego i dolnego efektywnych parametrów ośrodka dzięki wykorzystaniu dwóch komplementarnych metod numerycznego rozwiązywania równania przepływu; w szczególności możliwość oceny jakości efektywnej przepuszczalności oraz badanie wpływu gęstości dyskretyzacji na jakość rozwiązania.
- Opracowanie zestawu procedur numerycznych służących do rozwiązywania eliptycznych równań różniczkowych cząstkowych metodą standardową elementu skończonego oraz metodą elementu skończonego w sformułowaniu mieszano-hybrydowym w obszarach dwu- i trójwymiarowych.

- Opracowanie zestawu procedur służących do generowania siatek oraz ich zagęszczania w wybranych podobszarach.
- Opracowanie metodyki wyznaczania efektywnych przepuszczalności w pełnej anizotropowej postaci.
- Rozszerzenie metodyki do obszarów nieprostokątnych.
- Zaproponowanie metody rekonstrukcji współczynników przepuszczalności w drobnej skali poprzez ich dostrojenie do warunków przepływu w dużej skali.

#### 4. Skalowanie ze skali porowej do skali laboratoryjnej

Impulsem do podjęcia badań obejmujących skalę mikroskopową była identyfikacja za pomocą technik obliczeniowych nieliniowych modeli przepływu dla prędkości wykraczających poza zakres stosowalności prawa Darcy. Takie podejście stało się możliwe dzięki znaczącemu rozwojowi technologii komputerowych, jaki nastąpił w ostatnich latach.

Prace [H5], [H6] i [H7] dotyczą skalowania z poziomu mikroskali do skali laboratoryjnej. Podobnie jak w Części 3, powiązanie pomiędzy dwoma skalami otrzymuje się poprzez uśrednianie funkcji drobnej skali (ciśnienie i prędkość), tak aby na ich podstawie wyznaczyć współczynnik przepuszczalności charakteryzujący przepływ w dużej skali *continuum*. Powtórzenie procedury dla odpowiednio dużego zakresu zadanych prędkości przepływu dostarcza danych umożliwiających identyfikację modelu przepływu w skali laboratoryjnej dla prędkości wykraczających poza zakres stosowalności prawa Darcy.

Chronologicznie najwcześniejsza praca [H5] prezentuje metodykę podjętych badań (zapoczątkowanych w [14]) na przykładzie syntetycznych dwuwymiarowych struktur porowatych, stanowiących uproszczone reprezentacje ośrodka porowatego. Praca [H6] stanowi główne osiągnięcie w zakresie modelowania przepływów w mikroskali zawierając wyniki bardzo szczegółowych i wielokierunkowych eksperymentów zrealizowanych w oparciu o trójwymiarowe reprezentacje rzeczywistych ośrodków porowatych otrzymane z obrazów mikrotomograficznych. Na tle stanu wiedzy w literaturze przedmiotu uważam, że jest to jedno z obszerniejszych opracowań związanych z obliczeniowym modelowaniem przepływów w mikroskali, uwzględniających realistyczne geometrie i bezpośrednie numeryczne rozwiązania równań Naviera-Stokesa dla szerokiego zakresu prędkości. Praca [H7] przynosi uzupełnienia, przedstawiając zarys dyskretnych metod wyznaczania przybliżonych rozwiązań równań przepływu w mikroskali: metodę sieci porowych (ang. *Pore Network*) oraz metodę gazu sieciowego (ang. *Lattice-Boltzmann*) oraz zapoczątkowuje obiecującą tematykę wykorzystania symulacji przepływów i technik skalowania do modelowania procesów powodujących zmiany geometrii ośrodka w skali porów i badania ich wpływu na parametry w skali makroskopowej.

##### 4.1. Wirtualne laboratorium

Wyznaczanie parametrów ośrodka za pomocą technik obliczeniowych można porównać do pomiaru laboratoryjnego, stąd używane w prezentowanych pracach określenie *wirtualnego laboratorium*.

Wirtualne laboratorium składa się z następujących modułów:

- Dane do zdefiniowania zagadnienia w drobnej skali opisywanego za pomocą równań Naviera-Stokesa (1)-(2) obejmujące: (i) geometrię obszaru  $\Omega_F$ , (ii) parametry płynu, (iii) warunki brzegowe.
- Model numeryczny, w tym (i) siatka obliczeniowa, oraz (ii) kod numeryczny .
- Wyniki symulacji - rozwiązanie równań przepływu (1)-(2) w mikroskali.
- Wyznaczenie parametrów dużej skali oraz wiążących je zależności na podstawie uśrednionych funkcji modelu w drobnej skali.

W prezentowanym podejściu wykorzystuje się rozwiązania równań Naviera-Stokesa (1)-(2) uzyskane poprzez bezpośrednią dyskretyzację, w odróżnieniu od powszechniej stosowanych w kontekście modelowania w skali porowej metod dyskretnych takich jak metoda sieci porowych oraz metoda gazu sieciowego, [H7].

Użycie określenia *laboratorium* jest uzasadnione użytecznością badawczą tej koncepcji, bowiem poprzez połączenie symulacji oraz procedury skalowania możliwe jest nie tylko zastąpienie pomiaru laboratoryjnego przepuszczalności eksperymentem obliczeniowym, ale co więcej uzyskanie dodatkowych informacji, na przykład lokalnych rozkładów  $p$  i  $\mathbf{v}$ , przebiegów linii prądu oraz pełnej tensorowej postaci przepuszczalności, co pozwala identyfikować cechy anizotropowe ośrodka.

**Geometria ośrodka porowatego w mikroskali oraz siatki obliczeniowe.** Strukturę ośrodka porowatego w mikroskali na ogół opisuje się za pomocą syntetycznych wzorców lub opierając się na danych mikroobrazowych. Przykładem danych syntetycznych są geometrie wykorzystywane w [H5], reprezentujące ośrodek porowaty jako regularny dwuwymiarowy układ ziaren o kształcie kół lub elips. Innym przykładem danych syntetycznych są losowo generowane lub modyfikowane struktury ziaren (dane oznaczana jako  $B$  w [H6]).

Jednak największe możliwości, a równocześnie wyzwania, niesie za sobą uwzględnienie w obliczeniach rzeczywistych geometrii trójwymiarowych uzyskanych za pomocą mikrotomografii komputerowej [11, 22] oraz innych technik mikroobrazowania. W [H6] korzystano z danych rzeczywistych, opisujących ośrodek złożony ze szklanych kulek [16] oraz próbkę piaskowca [5]. Struktura ośrodka jest opisana za pomocą binarnej macierzy  $n_{ijk}$  odpowiadającej reprezentacji wokselsej  $\Omega = \cup \Omega_{ijk}$  pochodzącej z mikrotomografii. Woksel oznacza tu elementarną sześcienną jednostkę objętości.

Każdemu elementowi macierzy  $n_{ijk}$  przypisana jest informacja, czy jest to element szkieletu stałego  $\Omega_S$  czy element przestrzeni porowej  $\Omega_F$ ,

$$n_{ijk} = \begin{cases} 0 & \Omega_{ijk} \in \Omega_F \\ 1 & \Omega_{ijk} \in \Omega_S \end{cases} . \quad (22)$$

Ze względu na złożoną geometrię obszaru, wygenerowanie dyskretyzacji reprezentującej strukturę ośrodka porowatego jest trudnym zadaniem. W [H5] elementy obliczeniowe są trójkątami, a siatki zostały wygenerowane za pomocą preprocesora Gambit wchodzącego w skład oprogramowania ANSYS/Fluent. Siatki obliczeniowe w [H6] i [H7] są zbudowane z elementów sześciokątnych, odzwierciedlających wokselsewą strukturę danych. Siatki zostały skonstruowane przy użyciu własnego kodu.

Rozmiar danych generuje poważne wyzwanie obliczeniowe. Dlatego przed wygenerowaniem siatki dane podlegały redukcji. W [H6] zastosowano dwa sposoby zmniejszenia rozmiaru

zagadnienia: (i) redukcję rozdzielczości danych poprzez zastępowanie ośmiu sąsiadujących wokseli – jednym (w 3D); (ii) przeprowadzenie procedury skalowania na podstawie pewnego wycinka oryginalnej próbki. Wadą tego podejścia może być zbyt mały rozmiar próbki na to, aby móc uznać ją za reprezentatywny. Największe siatki wykorzystane w obliczeniach w [H6] zawierały ok. 30 milionów komórek; pociąga to za sobą duże rozmiary plików z danymi i wynikami, trudności w postprocessingu i wizualizacji.

**Numeryczne rozwiązywanie równań przepływu w mikroskali i warunki brzegowe.** Równania (1)-(2) były rozwiązywane za pomocą komercyjnego pakietu obliczeniowego ANSYS/Fluent [1] uznawanego za standard przemysłowy w obliczeniach CFD. Schematy numeryczne wykorzystują dyskretyzację metodą Skończonych Objętości. ANSYS/Fluent cechuje się dobrą skalowalnością, co pozwala efektywnie prowadzić obliczenia w trybie równoległym. Należy podkreślić konieczność pokonania licznych trudności wynikających przede wszystkim z niestandardowych geometrii ośrodków.

**Warunki brzegowe.** W pracach [H5], [H6] i [H7] założono, że przepływ jest wymuszany wyłącznie poprzez warunki brzegowe. Badane próbki  $\Omega$  miały kształt prostokąta (2D) lub prostopadłościanu (3D). Na jednym z brzegów zadawano prędkość wlotową  $v_{in}$ . Na brzegu przeciwnym nakładano warunek typu 'wypływ', w obliczeniach przyjmowano albo swobodny wypływ (warunek *outflow*), albo warunek typu *pressure outlet* [21]. Na wewnętrznych brzegach  $\Gamma$  obowiązywał warunek  $\mathbf{v} = 0$  (*no-slip*).

Analogicznie do przypadku skalowania parametrów ośrodków w skali *continuum* (Część 3), aby uwzględnić tensorowy charakter skalowanych współczynników, niezbędne jest trzykrotne (3D) rozwiązanie zagadnienia, w każdym z nich zadając przepływ w kierunku liniowo niezależnym do pozostałych. Z uwagi na główny cel badań, wszystkie obliczenia były wykonywane dla ciągu prędkości wlotowych  $v_{in}^{(j)}$ ,  $j = 1, \dots, MAX$ , należących zarówno do zakresu stosowności prawa Darcy jak i wykraczających poza ten zakres.

**Modele nieliniowe – wyniki.** Do wyznaczenia parametrów w większej skali niezbędne jest wyznaczenie uśrednionych wartości prędkości  $\mathbf{V}$  oraz gradientu ciśnienia  $\nabla P$ . Metoda wyznaczenia  $\nabla P$  została zainspirowana metodą Centralną Różnic Skończonych, [H5], [H6].

Każdy eksperyment obejmował wykonanie obliczeń dla ciągu prędkości wlotowych  $v_{in}^{(j)}$ ,  $j = 1, \dots, MAX$  według schematu:

- Dla każdej prędkości symulacje wykonywano trzykrotnie, zakładając główny kierunek przepływu oznaczany  $DIR$ ,  $DIR = 1, 2, 3$  zgodnie z kierunkami  $x$ ,  $y$  i  $z$ .
- Uśredniając wyniki symulacji ( $p_h^{(j,DIR)}$ ,  $\mathbf{v}_h^{(j,DIR)}$ ) otrzymano  $\nabla P^{(j,DIR)}$  oraz  $\mathbf{V}^{(j,DIR)}$ . Kluczowe wartości  $\mathbf{K}^{(j)}$  otrzymano jako rozwiązania układu równań liniowych  $\mathbf{V}^{(j,DIR)} = -\mathbf{K}^{(j)} \nabla P^{(j,DIR)}$ ,  $DIR = 1, 2, 3$

Ciąg wartości  $\mathbf{K}^{(j)}$ ,  $j = 1, \dots, MAX$ , stanowi podstawę do wyznaczenia modelu zjawiska w skali makroskopowej. Dla odpowiednio małych prędkości  $v^{(j)}$  wartości  $\mathbf{K}^{(j)}$  są stałe, co oznacza, że obowiązuje liniowe prawo Darcy. W miarę zwiększania prędkości wlotowych, obserwuje się zmniejszanie  $\mathbf{K}^{(j)}$ . W obliczeniach w [H6] dla  $v_{in}^{(MAX)}$  zaobserwowano około 50% redukcję  $\mathbf{K}^{(MAX)}$  w stosunku do  $\mathbf{K}^{(0)}$ . Dla większych wartości  $v_{in}$  są stwierdzono problemy z uzyskaniem zbieżności w stacjonarnym trybie obliczeń.

**Praktyczny anizotropowy model wykładniczy.** Jako główny wynik [H6] został sformułowany praktyczny wykładniczy model, w którym zarówno przepuszczalność  $\mathbf{K}$ , jak i współczynnik Forchheimera  $\beta$  są tensorami. Założenie, jakie sterowało procedurą identyfikacji modelu są stałe wartości  $\mathbf{K}$  i  $\beta$  dla całego zakresu uwzględnianych prędkości wlotowych, co jest zgodne z założeniem, że parametry reprezentują wyłącznie cechy ośrodka.

**Aspekty obliczeniowe.** Dużo uwagi poświęcono aspektom numerycznym. W szczególności badano wpływ następujących parametrów na rozwiązanie: (i) rozmiar dyskretyzacji – poziom zagęszczenia siatek [H5, H6], (ii) rozmiar obszaru uśredniania, (iii) poziom redukcji oryginalnych danych [H6], (iv) wykorzystanie w symulacjach wycinka próbki.

Symetria tensora reprezentującego współczynnik efektywny  $\mathbf{K}$  nie jest zagwarantowana w obliczeniach, bowiem wszystkie jego elementy są wyznaczone niezależnie. Odstępstwa od symetrii mogą być interpretowane jako miara (jedna z kilku wprowadzonych w [H6]) niedokładności numerycznego rozwiązania zagadnienia w drobnej skali.

Opanowanie metodologii skalowania ze skali porowej do skali laboratoryjnej otwiera szerokie perspektywy badawcze i definiuje nowe narzędzia do modelowania procesów zachodzących w ośrodkach porowatych poprzez badanie wpływu zjawisk zachodzących w mikroskali na charakterystykę ośrodka oraz modele obowiązujące w skali laboratoryjnej. Przykładem takiego zastosowania jest przedstawione w [H7] badanie jakościowej oceny efektów zmian geometrii ośrodka spowodowanych zarastaniem (ang. *clogging*) przestrzeni porowych na parametry efektywne. Zaproponowano statystyczny model wypełniania przestrzeni porowych w mikroskali. Wyznaczone w wyniku przeprowadzonych symulacji zależności parametrów efektywnych od zmian porowatości ośrodka odniesiono do analogicznych zależności w dużej skali uzyskanych na podstawie modeli wzrostu biofilmu dostępnych w literaturze.

Zmiany struktury ośrodków porowatych odgrywają ważną rolę w inżynierii środowiska. Wpływające na to procesy to w głównej mierze akumulacja materiałów w przestrzeni porowej oraz wzrost materiału biologicznego. Większość istniejących modeli opisujących takie procesy dotyczy makroskopowego punktu widzenia, wiążąc zmiany porowatości i zmiany przepuszczalności. Podejście mikroskopowe pozwala weryfikować i ulepszać znane modele oraz opracowywać nowe zależności.

**Podsumowanie.** Główne osiągnięcia cyklu prac [H5], [H6] i [H7] obejmują:

- Opracowanie wirtualnego laboratorium umożliwiającego prowadzenie symulacji przepływu oraz skalowanie dla ośrodków zarówno syntetycznych jak i rzeczywistych.
- Przeprowadzenie szerokiej gamy eksperymentów obliczeniowych pozwalających na ocenę wpływu uproszczeń i przyjmowanych założeń na parametry efektywne otrzymane przez skalowanie.
- Zweryfikowanie zakresu stosowalności prawa Darcy.
- Zaproponowanie praktycznego anizotropowego modelu wykładniczego w skali laboratoryjnej z parametrami wyznaczonymi metodą skalowania.
- Przeprowadzenie badań wpływu parametrów numerycznych symulacji (siatki dyskretyzacji, redukcja danych, obszar uśredniania) na parametry efektywne.

Są to wyniki reprezentujące poziom referencyjny w literaturze przedmiotu.

**Wykorzystanie i zastosowanie uzyskanych wyników.** Uzyskane wyniki i opracowane procedury obliczeniowe znajdują zastosowanie w różnych gałęziach badań.

Z punktu widzenia moich planów badawczych za najważniejsze kierunki uważam:

- Rozwijanie modeli zjawisk zachodzących w mikroskali, a zwłaszcza procesów powodujących zmiany geometrii porowej. Do tej pory stosowałam przybliżone modele statystyczne. Obecnie pracujemy nad modelowaniem wzrostu biofilmu wykorzystując pomiary mikrotomograficzne dokumentujące wzrost biofilmu.
- Weryfikację procedury skalowania poprzez wykorzystanie danych mikroobrazowych i porównanie z parametrami mierzonymi laboratoryjnie.
- W szczególności prowadzone są badania zmian przepuszczalności materiału podsadzkowego (ang. *proppant*) w procesie szczelinowania hydraulicznego, oraz badanie własności izolujących warstw mineralnych stosowanych do zabezpieczania wysypisk odpadów wykorzystujące podejścia skalowania.
- W szerokim zakresie możliwa jest adaptacja opracowanych metodologii do innych obszarów zastosowań.

Za bardzo ważne uważam połączenie badań obliczeniowych z eksperymentami. Pozwala to oprzeć obliczenia na danych rzeczywistych (struktura ośrodków oraz przebieg procesów zachodzących w mikroskali). Umożliwia również weryfikację obliczeń poprzez porównanie parametrów zmierzonych eksperymentalnie oraz wyznaczonych za pomocą skalowania.

## **5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych.**

Poza pracami [H1]–[H7] wymienionymi jako podstawa osiągnięcia naukowego jestem współautorką innych prac poświęconych zagadnieniom skalowania w ośrodkach porowatych.

Artykuł **W. Zijl, A. Trykozko, *Numerical homogenization of two-phase flow in porous media, Computational Geosciences 6 (2002), 49-71*** prezentuje rozszerzenie metody homogenizacji opisanej w [H1], [H2] i [H3] na przypadek przepływów dwufazowych. Głównym wynikiem było wyznaczenie przez skalowanie zależności dużej skali opisującej nasycenie w funkcji ciśnienia kapilarnego oraz względną przepuszczalność w funkcji nasycenia. Również w tej pracy zastosowano metodę elementu skończonego w dwóch sformułowaniach, a eksperymenty przeprowadzono zarówno dla przypadków obszarów prostopadłościennych jak i dla obszarów o geometrii cylindrycznej.

Artykuł **A. Trykozko, W. Zijl, *Complementary finite element methods applied to the numerical homogenization of 3D absolute permeability, Communications in Numerical Methods in Engineering 18 (2002), 31-41*** był z założenia krótkim komunikatem opisującym koncepcję wykorzystania komplementarnych metod numerycznych w procedurze skalowania.

Rozszerzenie metody rekonstrukcji rozkładu przepuszczalności w drobnej skali wprowadzonej w [H4] znajduje się w artykule **A. Trykozko: *Downscaling. Fine-scale conductivity identification by inverse modelling, Paper #196 in Proceedings of CMWR XVIII in Barcelona, June 21-24, 2010***. Przeprowadzone w tej pracy eksperymenty numeryczne wykorzystywały statystyczne rozkłady początkowe przepuszczalności.

Początkowy etap badań związanych z tematyką skalowania z mikroskali do skali laboratoryjnej został udokumentowany w kilku artykułach:



M. Peszyńska, A. Trykozko, K. Augustson, *Computational upscaling of inertia effects from pore scale to mesoscale*, In: G. Allen, J. Nabrzyski, E. Seidel, D. van Albada, J. Dongarra, and P. Soot, editors, ICCS 2009 Proceedings, LNCS 5544, Part I, pp. 695-704, Berlin-Heidelberg, 2009. Springer-Verlag,

M. Peszyńska, A. Trykozko, W. Sobieski, *Forchheimer law in computational and experimental studies of flow through porous media at pore scale and mesoscale*, GAKUTO International Series, Mathematical Sciences and Applications, Vol. 32 (2010), 463-482, oraz

M. Peszyńska, A. Trykozko, K. Kennedy, *Sensitivity to parameters in non-Darcy flow model from pore scale through mesoscale*, Paper #46 in Proceedings of CMWR XVIII in Barcelona, June 21-24, 2010.

Kolejne prace wykraczają poza tematykę skalowania.

Artykuł W. Sobieski, A. Trykozko, *Sensitivity aspects of Forchheimer's approximation*, *Transport in Porous Media*, 89 (2), 155–164 (2011) został oparty o eksperyment laboratoryjny umożliwiający pomiar przepuszczalności kolumny wypełnionej granulatem i dotyczył badania efektów nieliniowych w przepływach, w tym wyznaczania parametrów równania Forchheimera (8) na podstawie danych pomiarowych. Przeprowadzono numeryczne badanie wrażliwości modelu nieliniowego ze względu na wybrane parametry. Stanowiło to uzupełnienie badań odnoszących się do wyznaczania nieliniowych modeli przepływu za pomocą modelowania w mikroskali. W [15] znajduje się przykład powiązania wyników symulacji w mikroskali oraz wyników eksperymentu laboratoryjnego.

W latach 2001-2003 uczestniczyłam w realizacji projektu *Modelowanie i optymalizacja kardiochirurgicznych zespołów naczyniowych*. Mój udział polegał głównie na konstrukcji siatek obliczeniowych, prowadzeniu symulacji komputerowych oraz wizualizacji wyników. Wyniki zostały podsumowane w pracy J. Waniewski, W. Kurowska, J. Mizerski, A. Trykozko, K. Nowiński, G. Brzezińska-Rajszyś, A. Kościeszka A., *The effects of graft geometry on the patency of a systemic-to-pulmonary shunt: a computational fluid dynamics study*, *Artificial Organs* 29 (2005) (9):642-650.

## Literatura

- [1] ANSYS, Inc. *ANSYS FLUENT User's Guide, Rel. 15.0*, 2014.
- [2] J. Bear, *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Dover Publications, Inc., New York, 1972.
- [3] J. Bear, A. Cheng, *Modeling groundwater flow and contaminant transport*, Springer, 2010.
- [4] A. Bensoussan, J.-L. Lions, G. Papanicolau, *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1978.
- [5] R. Cai, B. Lindquist, W. Um, K. Jones, *Tomographic analysis of reactive flow induced pore structure changes in column experiments*, *Advances in Water Resources*, 32, 1392–1403 (2009)
- [6] L.J. Durlofsky, *Upscaling and gridding of fine scale geological models for flow simulation*, Proceedings of the 8th International Forum on Reservoir Simulation, Stresa, Italy, June 20–25 (2005).

- [7] C. Garibotti, M. Peszyńska, *Upscaling non-Darcy flow*, *Transport in Porous Media* 80, 401–430 (2009).
- [8] T. Giorgi, *Derivation of Forchheimer law via matched asymptotic expansions*, *Transport in Porous Media*, 29, 191-206 (1997).
- [9] H. Huang, J. Ayoub, *Applicability of the Forchheimer equation for non-Darcy flow in porous media*, *SPJ Journal*, 112–122, (March 2006).
- [10] E.F. Kaaschieter, A.J.M. Huijben, *Mixeded-hybrid finite elements and streamline computations for potential flow problems*, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 8, 221–246, (1992).
- [11] J. Kaczmarczyk, M. Dohnalik, J. Zalewska, *Evaluation of carbonate rock permeability with the use of X-ray computed microtomography*, *NAFTA-GAZ*, 4:233–238, (2011).
- [12] B. Lucquin, O. Pironneau, *Introduction to scientific computing*, John Wiley & Sons, New York, 1998.
- [13] J. Małecki, M. Nawalany, S. Witczak, T. Gruszczyński, *Wyznaczanie parametrów migracji zanieczyszczeń w ośrodku porowatym dla potrzeb badań hydrogeologicznych i ochrony środowiska*, Uniwersytet Warszawski, Warszawa, 2006.
- [14] M. Peszyńska, A. Trykozko, K. Augustson, *Computational upscaling of inertia effects from porescale to mesoscale*, In: G. Allen, J. Nabrzyski, E. Seidel, D. van Albada, J. Dongarra, and P. Slood, editors, *ICCS 2009 Proceedings*, LNCS 5544, Part I, pp. 695-704, Berlin-Heidelberg, 2009. Springer-Verlag.
- [15] M. Peszyńska, A. Trykozko, W. Sobieski, *Forchheimer law in computational and experimental studies of flow through porous media at porescale and mesoscale*, *GAKUTO International Series, Mathematical Sciences and Applications*, Vol. 32 (2010), 463-482.
- [16] M. Porter, M. Schaap, D. Wildenschild, *Lattice-Boltzmann simulations of the capillary pressure– saturation– interfacial area relationship for porous media*, *Advances in Water Resources*, 32, 1632–1640 (2009).
- [17] P.-A. Raviart, J.-M. Thomas, *A mixed finite element method for 2nd order elliptic problems*. In: I. Galligani and E. Magenes (eds.) *Mathematical aspects of Finite Element Method*, *Lecture Notes in Mathematics* 606, Springer, 1977.
- [18] Ph. Renard, G. de Marsilly, *Calculating equivalent permeability: a review*, *Advances in Water Resources*, 20 (5-6), 1997, 253–278.
- [19] E. Sanchez-Palencia, *Nonhomogeneous Media and Vibration Theory*, In: *Lecture Notes in Physics*, vol. 127, Springer, Berlin, 1980.
- [20] A. Trykozko, *Downscaling. Fine-scale conductivity identification by inverse modelling*, Paper #196 in *Proceedings of CMWR XVIII in Barcelona*, June 21-24, 2010, available online at <http://congress.cimne.com/CMWR2010/Proceedings>.
- [21] J. Tu, G.H. Yeoh, C. Liu, *Computational Fluid Dynamics, a practical approach*, Elsevier, 2008.

- [22] D. Wildenschild, A.P. Sheppard, *X-ray imaging and analysis techniques for quantifying pore-scale structure and processes in subsurface porous medium systems*, *Advances in Water Resources*, 51, 217–246 (2013).