

SCTEMM 2013

**SUPERCOMPUTER TECHNOLOGIES
OF MATHEMATICAL MODELLING**
Second international conference

**СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**
Вторая международная конференция

Proceedings

Труды конференции

July, 8-11, 2013 / 8-11 июля 2013 г.
Yakutsk, Russia / Якутск, Россия

NEFU



СВФУ

M.K. Ammosov North-Eastern Federal University
Северо-Восточный федеральный университет
им. М.К. Аммосова

**Supercomputer technologies of
mathematical modelling**

Second international conference

**Суперкомпьютерные технологии
математического моделирования**

Вторая международная конференция

**Proceedings
Труды конференции**

July, 8 – 11, 2013 / 8 – 11 июля 2013 г.
Yakutsk, Russia / Якутск, Россия

Якутск 2014

УДК 519.6
ББК 22.18

Утверждено научно-техническим советом СВФУ

Рецензенты:

П.П. Пермяков, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник ИФТПС СО РАН;

Ю.М. Григорьев, д.ф.-м.н., зав. кафедрой теоретической физики ФТИ СВФУ

Суперкомпьютерные технологии математического моделирования : труды II Международной конференции / Под ред. В.И. Васильева. – Якутск : Издательский дом СВФУ, 2014. – 270 с.

ISBN 978-5-7513-1910-6

В сборник включены научные статьи участников второй международной конференции «Суперкомпьютерные технологии математического моделирования».

This collection of proceedings of second International Conference «*Supercomputer technologies of mathematical modelling*».

УДК 519.6
ББК 22.18

ISBN 978-5-7513-1910-6

© Северо-Восточный федеральный университет, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|-----|
| Предисловие | 5 |
| <i>Акимов М.П., Старостин Н.П., Мордовской С.Д.</i> Численное исследование динамики температурного поля многолетнемерзлых грунтов при воздействии бесканальных подземных трубопроводов теплоснабжения | 8 |
| <i>Антонов М.Ю.</i> Исследование динамики и трансмембранной диффузии методами компьютерного моделирования | 16 |
| <i>Афанасьева Н. М.</i> Устойчивые схемы для задач конвекции-диффузии-реакции | 30 |
| <i>Вабищевич П.Н., Васильев В.И.</i> Вычислительные технологии: подготовка специалистов | 40 |
| <i>Вабищевич П.Н., Григорьев А.В.</i> Численное моделирование фильтрации на основе модели двойной пористости | 50 |
| <i>Добронец Б.С.</i> Постобработка решений метода конечных элементов с эрмитовым базисом | 61 |
| <i>Матус П.П.</i> Об устойчивости разностных схем для нелинейных эволюционных задач | 68 |
| <i>Михайленко Б.Г., Глинский Б.М., Черных И.Г.</i> Суперкомпьютерные технологии решения больших задач в Сибирском суперкомпьютерном центре | 78 |
| <i>Цыпкин Г.Г.</i> Блокирование течений в проницаемых пористых средах и многозначные решения | 89 |
| <i>Чашечкин Ю.Д., Загуменный Я.В.</i> Дифференциальная механика жидкостей: согласованные аналитические, численные и лабораторные модели стратифицированных течений | 100 |
| <i>Эверстов В.В., Мордовской С.Д.</i> Плоская динамическая задача термомеханических равновесий | 111 |
| <i>Яковлев П.Г.</i> Вариант обобщения метода Кабаре на треугольные сетки | 121 |
| <i>Bondarev E.A., Rozhin I.I., Argunova K.K.</i> Simulation of hydrate formation in gas wells at thermal interaction with rocks | 130 |
| <i>Bulatov V.V., Vladimirov Yu.V.</i> Fundamental problems of natural stratified medium wave dynamics: theory, measurements, applications | 140 |
| <i>Carstensen C., Merton C.</i> Pre- and Post-Processing for Effective Finite Element Error Control in the Poisson and the Obstacle Problem | 145 |

| | |
|---|-----|
| <i>Cheng Q., Sun Y., Zhao Y.</i> Experimental evaluation of soil freezing-thawing PDE model using soil freezing characteristic curve | 155 |
| <i>Faragó I.</i> Reliable numerical models for parabolic problems | 164 |
| <i>Gavriliieva A., Gubarev Yu.</i> To adequacy problem unstability of steady-state plane-parallel shearing flows in ideal stratified fluid | 174 |
| <i>Gavrilyuk I.</i> Three recipes for constructing of exponentially convergent algorithms for operator equations | 182 |
| <i>Gonsai A., Goswami B., Kar N.</i> Study of supercomputer's architecture, application and its future use | 192 |
| <i>Il'ichev A., Tsyarkin G.</i> Interaction of stabilizing and destabilizing factors and bifurcations of a phase interface in a geothermal system | 202 |
| <i>Kumar S.</i> Discontinuous finite volume element methods and its applications to miscible displacement problems | 212 |
| <i>Kumar V., Raghunath S., Labade M., Kumar S., Paul S., Kumar S.</i> Compressible Flow Simulation of Aerospace Applications using High Performance Computing | 222 |
| <i>Tsichritzis D., Hristopulos D.</i> The triangle of knowledge applied in a remote region | 238 |
| <i>Park S.H., Lee S., Yun I.D.</i> Medical image segmentation using MRF-based optimization | 247 |
| <i>Shargatov V., Il'ichev A., Krivosheev A.</i> Numerical modeling of filtration flows and evaporation fronts in low permeability nonwetable porous medium | 254 |
| <i>Sidnyaev N.I.</i> Fundamental approaches of definition of parametres turbulent boundary a layer in a supersonic stream | 263 |

Предисловие

Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова совместно с Математическим институтом имени В.А. Стеклова РАН, Институтом системного программирования РАН, Нижегородским государственным университетом имени Н.И.Лобачевского при поддержке Правительства Республики Саха (Якутия), финансовой поддержке компаний HP, Inline Group, NVidia, Compulink, INTEL, Display Group, ЗАО «Ресурс Сервис» провели II Международную конференцию «Суперкомпьютерные технологии математического моделирования» с 8 по 11 июля 2013 года в г. Якутске. Решение о проведении II Международной конференции было принято по итогам первой Международной конференции «Суперкомпьютерные технологии математического моделирования», проведенной в СВФУ в 2011 г.

Работа конференции проводилась по следующим направлениям:

1. Математические проблемы механики сплошных сред;
2. Вычислительные алгоритмы математического моделирования;
3. Программное обеспечение высокопроизводительных вычислений;
4. Суперкомпьютерные технологии решения прикладных проблем;
5. Проблемы подготовки специалистов в области параллельных вычислений.

На конференции были обсуждены современные проблемы математического моделирования механики сплошных сред, вычислительных алгоритмов на многопроцессорных системах, перспективы развития параллельных вычислительных технологий, обмен опытом подготовки специалистов по параллельным компьютерным технологиям. В работе конференции приняли участие ведущие ученые России и зарубежных стран (Белоруссия, Великобритания, Венгрия, Германия, Греция, Индия, Канада, Китай, Корея), представители компаний HP, Inline Group, NVidia, INTEL. Всего в работе конференции приняли участие 131 человек, в том числе 64 иногородних участника, из которых 19 — иностранные ученые. Среди участников конференции – 7 академиков РАН, 5 член-корреспондентов РАН, 31 доктор наук и 25 кандидатов наук. За время работы конференции было заслушано 11 пленарных и 55 секционных докладов, тематика которых охватила широкий круг вопросов, связанных с применением высокопроизводительных вычислительных систем и параллельных алгоритмов математического моделирования. Наибольший интерес вызвали доклады, посвященные математическим проблемам механики сплошных сред, вычислительным алгоритмам математического моделирования, программному обеспечению высокопроизводительных вычислений, вычислительной гидродинамике, вычислительным технологиям решения прикладных задач, вычислительным методам решения задач фильтрации,

численным методам математической физики, прикладным проблемам математического моделирования. Участниками конференции отмечен высокий научный уровень докладов, ярко-выраженная прикладная направленность исследований. К началу работы конференции был опубликован сборник тезисов докладов, а также действовал сайт конференции по адресу <http://sctemm.s-vfu.ru>.

По итогам работы международной конференции были достигнуты следующие соглашения:

- о межвузовском сотрудничестве в целях поддержки двусторонних научных и образовательных контактов, осуществления научно-технических мероприятий, совместных исследовательских проектов между СВФУ им. М.К. Аммосова и Университетом имени Лоранда Этвёша (Будапешт, Венгрия, профессор Иштван Фараго);
- о сотрудничестве в целях решения уставных задач, развития научно-исследовательской деятельности, расширения материально-технической базы исследований, привлечения дополнительного финансирования и стимулирования производства между СВФУ им. М.К. Аммосова и Московским государственным техническим университетом им. Н.Э.Баумана (Москва, профессор Н.И. Сидняев);
- о создании в СВФУ Центра компетенции СВФУ-Intel по высокопроизводительным вычислениям (Новосибирск, операционный директор отделения исследований и разработок корпорации INTEL А.В. Авдеев).

Участники II Международной конференции «Суперкомпьютерные технологии математического моделирования» приняли единогласно следующее решение:

1. Высоко оценить работу Программного и Организационного комитетов по организации и проведению международной конференции.
2. Опубликовать на сайте конференции сборник тезисов докладов конференции, а также презентации докладчиков.
3. Опубликовать сборник докладов международной конференции.
4. Учитывая актуальность тематики научных исследований и прикладную направленность конференции, рекомендовать руководству СВФУ проведение международной конференции по тематике суперкомпьютерного математического моделирования на регулярной основе.
5. Организовать и провести следующую Международную конференцию «Суперкомпьютерные технологии математического моделирования» в Северо-Восточном федеральном университете имени М.К. Аммосова в 2016 году.

Во исполнение постановления, принятого по итогам конференции, отдельные работы, представленные участниками конференции, публикуются в данном издании.

Васильев Василий Иванович – д.ф.-м.н., профессор,
сопредседатель Оргкомитета СКТЕММ-2013.

Численное исследование динамики температурного поля многолетнемерзлых грунтов при воздействии бесканальных подземных трубопроводов теплоснабжения

Акимов М.П.¹, Старостин Н.П.², Мордовской С.Д.¹

¹*Северо-Восточный федеральный университет им. М.К.Аммосова, Якутск,
Россия;*

mirakimov@mail.ru

msd@mail.ru

²*Институт проблем нефти и газа СО РАН, Якутск, Россия;*

nikstar56@mail.ru

Аннотация

Рассматривается задача определения динамики температурного поля грунта при бесканальной прокладке подземного трубопровода с теплоносителем, эксплуатируемого в регионах многолетнемерзлых грунтов. Соответствующую двумерную задачу Стефана предлагается решать в полярных координатах методом сквозного счета, используя схему расщепления в целых шагах. Приводятся результаты вычислительных экспериментов по прогнозированию зоны оттаивания вокруг теплопровода.

Ключевые слова: трубопровод, температура, теплопроводность, фазовый переход, задача Стефана, аппроксимация, алгоритм, изотерма

Введение

При исследовании влияния подземного полимерного трубопровода с теплоизоляцией в процессе эксплуатации на вечномерзлый грунт температурную задачу обычно решают методом конечных разностей в декартовой системе координат. При таком подходе возникают сложности с аппроксимацией границ рассматриваемой области. В плоском случае границы расчетной области представляют собой отрезки прямых и полуокружностей, что затрудняет выбор системы координат для построения расчетной сетки. При использовании декартовой системы координат приходится аппроксимировать окружности ломаными линиями, что, естественно, влияет на точность определения температурного поля в многослойной трубе ввиду наличия условий теплового контакта между трубой и теплоизоляцией. В данной работе на основе решения двумерной задачи Стефана в полярных координатах исследуется процесс оттаивания-промерзания грунта вокруг подземного трубопровода теплоснабжения из полиэтилена с тепловой изоляцией из пенополиуретана в полиэтиленовой оболочке. Адекватность математической модели реальному теплово-

му процессу подтверждена сопоставлением расчетных и экспериментальных температурных данных, полученных около действующего теплопровода в г. Якутска. Приводятся результаты вычислительных экспериментов по исследованию влияния толщины теплоизоляции и заглубления теплопровода на оттаивание-промерзание многолетнемерзлого грунта. Установлено, что при воздействии бесканальных подземных полимерных трубопроводов теплоснабжения на многолетнемерзлый грунт существует толщина теплоизоляции и глубина заложения, определяемая расчетом, при которых глубина оттаивания в регионах холодного климата восстанавливается до глубины сезонного оттаивания к началу отопительного сезона.

Прикладные проблемы математического моделирования

В регионах с многолетнемерзлыми грунтами актуальной является проблема прогнозирования зон оттаивания при воздействии подземных трубопроводов с теплоносителями. Такие задачи возникают, например, при прокладке тепловых сетей зданий и сооружений нефтяной и газовой промышленности. В настоящее время в регионах с многолетнемерзлыми грунтами эксплуатируются опытно-промышленные бесканальные варианты подземных трубопроводов теплоснабжения из сшитого полиэтилена, армированного нитью из арамидного волокна (кевлара), с тепловой изоляцией из пенополиуретана в полиэтиленовой оболочке. Преимущества такого способа укладки принципиально новых видов труб – из полимерных материалов в заводской теплоизоляции очевидны: они не подвержены коррозии, не зарастают отложениями и потому служат многие десятки лет. Весьма ценным качеством является их гибкость, позволяющая поставлять их на объекты длинномерными отрезками необходимой длины, в подавляющем большинстве случаев обходиться без стыков и проходить повороты трассы без применения фасонных деталей. Такие трубы не требуют компенсаторов. Благодаря малому весу труб монтажные работы осуществляются без применения грузоподъемной техники. Тем не менее, нормативная база по проектированию и монтажу таких трубопроводов отстает от требований практики. Исследование динамики температурного поля подземного полимерного трубопровода с теплоизоляцией в процессе эксплуатации на вечномерзлый грунт является актуальной задачей, решение которой позволит разработать рекомендации по применению перспективных трубопроводов в регионах холодного климата, а также будет способствовать внесению изменений в существующие отраслевые и строительные нормативные документы. Кроме того, согласно существующим нормативным документам [1] при строительстве тепловых сетей в районах многолетнемерзлых грунтов выбор мероприятий по сохранению их устойчивости должен выполняться на основе расчетов зоны оттаивания мерзлого грунта около трубопроводов. Расстояния в свету по горизонтали от тепловых сетей при их подземной прокладке до фундаментов зданий и сооружений, строящихся по принципу I (с сохранением вечной мерзлоты), должны приниматься не менее 2 м от зоны

оттаивания грунта около канала, определяемом расчетом. В то же время, численному моделированию теплового взаимодействия трубопровода с грунтом уделяется недостаточное внимание. При решении задачи определения нестационарного температурного поля в системе «труба-грунт» с учетом дневной поверхности методом конечных разностей трудности возникают вследствие сложности рассматриваемой области. В плоском случае границы расчетной области представляют собой отрезки прямых и полуокружностей, что затрудняет выбор системы координат для построения расчетной сетки. Обычно такую задачу решают, используя уравнение теплопроводности в декартовой системе координат [2]. Такой подход для определения температурного поля в многослойной трубе осложняется ввиду наличия условий теплового контакта между слоями. При исследовании влияния теплоносителя в трубе на тепловое состояние грунта, приближенное задание границ в непосредственной близости от теплообменной поверхности может привести к существенным погрешностям при определении границ оттаивания. Для более точного описания температурного поля в окрестности трубы с теплоносителем перспективным представляется решение задачи теплопроводности в полярных координатах. Естественно, при этом приближенно будут описаны прямые участки границ области, что также снизит точность расчета, но можно предположить, что их влияние на определение границ оттаивания будет значительно ниже. Примем допущение, что температурный режим теплоносителя в трубопроводе вдоль трубы меняется слабо, а величина заглубления теплопровода практически не меняется по трассе, что позволяет пренебречь тепловыми потоками вдоль теплопровода. Тогда задачу о формировании температурного режима в системе «труба-грунт» можно рассматривать как двумерную в полярных координатах (1).

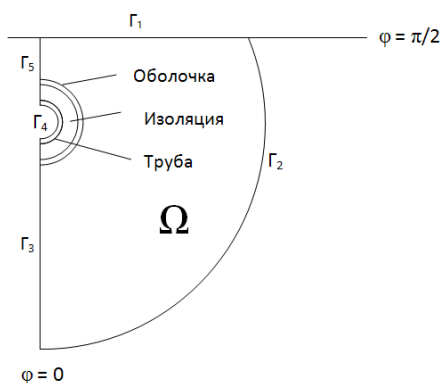


Рис. 1: Расчетная область грунта вокруг теплопровода.

Задача решалась известным методом сквозного счета. Математическая постановка задачи Стефана со сглаженными коэффициентами формулируется сле-

дующим образом: Требуется определить нестационарное температурное поле $T(r, \varphi, t)$, удовлетворяющее уравнению теплопроводности в полярных координатах:

$$\tilde{C}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \tilde{\lambda}(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\tilde{\lambda}(T) \frac{\partial T}{\partial \varphi} \right) \quad (1)$$

граничному условию на дневной поверхности грунта:

$$\tilde{\lambda}(T) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \varphi} \sin \varphi - \frac{\partial T}{\partial r} \cos \varphi \right) \Big|_1 = -\alpha_1 (T(r, \varphi, t)|_1 - T(t)) \quad (2)$$

граничным условиям на границах Γ_2 , Γ_3 и Γ_5 :

$$\tilde{\lambda}(T) \left(\frac{\partial T}{\partial r} \sin \varphi + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \varphi} \cos \varphi \right) \Big|_{\Gamma_2} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \varphi} \Big|_3 = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial \varphi} \Big|_5 = 0 \quad (4)$$

граничному условию на внутренней поверхности теплопровода:

$$\tilde{\lambda}(T) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_4 = \alpha_2 (T(r, \varphi, t)|_4 - T) \quad (5)$$

и начальному условию:

$$T(r, \varphi, 0) = T(r, \varphi) \quad (6)$$

На границах слоев заданы условия идеального теплового контакта:

$$\begin{cases} \tilde{\lambda}_i(T) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=r_{i-0}} = \tilde{\lambda}_i(T) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=r_{i+0}}, \\ T(r_{i-0}, \varphi, t) = T(r_{i+0}, \varphi, t), \end{cases} \quad (7)$$

$i=1,2,3$.

Численное решение производится на неравномерной сетке $\widehat{\omega}_{ho}$:

$$\widehat{\omega}_{h_1} = \{r_i, \quad i = \overline{0, N}, \quad h_i^1 = r_i - r_{i-1}, \quad i = \overline{1, n_i}\} \quad (8)$$

$$\widehat{\omega}_{h_2} = \{\varphi_j, \quad j = \overline{0, M}, \quad h_j^2 = \varphi_j - \varphi_{j-1}, \quad j = \overline{1, m_j}\} \quad (9)$$

$$\widehat{\omega}_{h\tau} = \widehat{\omega}_{h_1} \times \widehat{\omega}_{h_2} \times \overline{\omega}_\tau, \quad h_i^1 = \frac{h_i + h_{i+1}}{2}, \quad h_j^2 = \frac{h_j + h_{j+1}}{2} \quad (10)$$

Двумерное уравнение теплопроводности (1) записывается в форме удобной для решения методом сквозного счета, решается численно конечно-разностным методом. Используется схема расщепления в целых шагах с методом суммарной аппроксимации. Введем временную сетку

$$\bar{\omega}_\tau = \{t_k, t_k = t_{k-1} + \tau_k, k = \overline{1, N_\tau}, t_0 = 0, t_{N_\tau} = T_G\} \quad (11)$$

где T_G – время конца счета. Тогда на каждом временном интервале $[t_{j-1}, t_j]$ задача решаются две одномерные задачи с граничными условиями, полученными естественным методом расщепления [3,4]:

$$\tilde{C}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \tilde{\lambda}(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad t_k < t < t_{k+1/2} \quad (12)$$

$$T(r, \varphi, 0) = T_0(r, \varphi) \quad (13)$$

$$T(r, \varphi, t_k) = \tilde{T}(r, \varphi, t_k) \quad (14)$$

$$\tilde{\lambda}(T) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_1 = \alpha_1 (T(r, \varphi, t)|_1 - T(t)) \cos \varphi \quad (15)$$

$$\tilde{\lambda}(T) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_4 = \alpha_2 (T(r, \varphi, t)|_4 - T) \quad (16)$$

$$\tilde{\lambda}(T) \left(\frac{\partial T}{\partial r} \sin \varphi \right) \Big|_{\Gamma_2} = 0 \quad (17)$$

$$\tilde{C}(T) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\tilde{\lambda}(\tilde{T}) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \varphi} \right), \quad t_{k+1/2} < t < t_{k+1} \quad (18)$$

$$\tilde{T}(r, \varphi, t_{k+1/2}) = T(r, \varphi, t_{k+1/2}) \quad (19)$$

$$\tilde{\lambda}(T) \frac{1}{r} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \varphi} \Big|_1 = -\alpha_1 (\tilde{T}(r, \varphi, t)|_1 - \tilde{T}(t)) \sin \varphi \quad (20)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial \varphi} \Big|_3 = 0 \quad (21)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial \varphi} \Big|_5 = 0 \quad (22)$$

Таблица 1: Сопоставление расчетных и фактических температур, в скважине №1

| Температура грунтов, °С | | | | |
|-------------------------|--------------|-----------|--------------|-----------|
| | 26.12.2012г. | | 05.05.2012г. | |
| Глубина,м | Фактические | Расчетные | Фактические | Расчетные |
| 1 | -6,1 | -5,15 | -0,5 | -0,35 |
| 2 | -0,1 | -0,12 | -2,8 | -2,97 |
| 3 | -0,4 | -0,46 | -3,8 | -4,56 |
| 4 | -0,9 | -1,07 | -3,7 | -4,52 |
| 5 | -1,3 | -1,51 | -3,5 | -3,99 |
| 6 | -1,6 | -1,9 | -3,1 | -3,51 |
| 7 | -1,8 | -2,1 | -2,8 | -3,04 |
| 8 | -2 | -2,55 | -2,7 | -2,64 |
| 9 | -2,2 | -2,75 | -2,7 | -2,6 |

Приближенным решением задачи (1)-(7) является решение задачи (18)-(22), т.е. $\tilde{T}^{j+1} \approx T^{j+1}$. Таким образом, решение одной из задач является начальным условием для другой. Алгоритм решения сформулированной задачи заключается в последовательном решении одномерных задач по первому и второму направлениям. Каждую из одномерных задач решаем методом сквозного счета.

Рассматривалась система из трех труб с эквивалентным радиусом 8,15 см и толщиной теплоизоляции 3 см. Расчеты проводились с использованием разработанного в работе алгоритма численного определения динамики температурного поля в системе «труба-грунт» в полярных координатах. Прежде чем использовать математическую модель для решения практических задач ее необходимо верифицировать, т.е. проверить ее адекватность реальному процессу. Верификация модели сводится к сопоставлению результатов расчетов по модели с соответствующими данными действительности – фактическими экспериментальными данными, полученными в скважине №1, расположенной на расстоянии 0,8 м, и скважине №2 – на расстоянии 1,2 м от теплопровода.

Результаты сопоставления показывают, что отклонения расчетных и фактических температур составляет 15-20%, что приемлемо для практического применения.

На основе вычислительных экспериментов разработаны методики для определения толщины теплоизоляции и глубины заложения трубопровода, заключающейся в восстановлении глубины оттаивания под воздействием теплопровода к началу отопительного сезона до глубины деятельного слоя. Для теплопровода диаметром 110 мм (прямая и обратная) с сопутствующим трубопроводом для холодной воды диаметром 50 мм и с толщиной теплоизоляции 3 см рекомендуется величина заглубления, равная 70 см. Для такого же пучка труб теплопровода с толщиной теп-

Таблица 2: Сопоставление расчетных и фактических температур, в скважине №2

| Температуры грунтов, °С | | | | |
|-------------------------|--------------|-----------|--------------|-----------|
| | 26.12.2012г. | | 05.05.2012г. | |
| Глубина, м | Фактические | Расчетные | Фактические | Расчетные |
| 1 | -5,1 | -6,25 | -1,8 | -2,02 |
| 2 | -0,5 | -0,86 | -4,1 | -4,26 |
| 3 | -1,1 | -0,98 | -5,2 | -6,02 |
| 4 | -1,5 | -1,81 | -5,5 | -5,8 |
| 5 | -1,8 | -2,10 | -5,4 | -4,99 |
| 6 | -2,2 | -2,58 | -5 | -4,5 |
| 7 | -2,6 | -3,15 | -4,5 | -4,22 |
| 8 | -2,9 | -2,92 | -4,1 | -4,05 |
| 9 | -3 | -3 | -3,8 | -3,85 |

лоизоляции 4 см рекомендуется заглубление до 90 см, а с толщиной теплоизоляции 5 см заглубление до 110 см. Расчетные область изменения величины заглублений при различных толщинах теплоизоляции представлены на рис. 2.

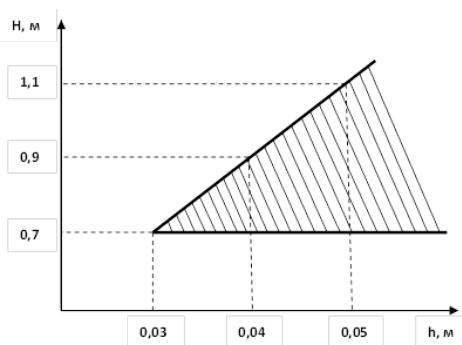


Рис. 2: Область изменения величины заглублений при различных толщинах теплоизоляции.

Математическим моделированием показано, что для рассматриваемого подземного теплопровода расчетная величина заглубления при заданной толщине теплоизоляции обеспечивает на начало отопительного сезона стабильные глубины оттаивания вечномерзлого грунта на уровне деятельного слоя. Более точные результаты по определению заглубления теплопровода могут быть получены расчетами методом конечных элементов воздействия пучков теплоизолированных труб теплоснабжения на многолетнемерзлые грунты с использованием вычислительных систем

высокой производительности.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *СН и П 41-02-2003*. Тепловые сети (приняты Постановлением Госстроя РФ от 24.06.2003 №110) // Гарант: информ.-правовой портал
- [2] *Размазин Г.А., Моисеев Б.В.* Тепловое взаимодействие бесканальной прокладки теплопроводов с вечномерзлыми грунтами// Проблемы строительства, инженерного обеспечения и экологии городов: сб. материалов /I Международ. науч.-практ.конф. Пенза: изд-во ПДЗ, 2000. - С.106-110.
- [3] *Охлопков Н.М.* О некоторых разностных методах решения задач для дифференциальных уравнений. Иркутск: изд-во Иркут.ун-та. 1986. - 209 с.
- [4] *Слепцов, В.И. Мордовской С.Д., Изаксон В.Ю.* Математическое моделирование теплообменных процессов в многолетнемерзлых горных породах. Новосибирск: Наука. Сибирская издательская фирма РАН, 1996. - 104с.

Исследование динамики и трансмембранной диффузии методами компьютерного моделирования

Антонов М.Ю.¹, Науменкова Т.В.², Левцова О.В.², Шайтан К.В.²

¹*Северо-Восточный федеральный университет, Якутск, Россия;*

mikhail@s-vfu.ru

²*Биологический факультет МГУ, Москва, Россия;*

Аннотация

В работе метод молекулярной динамики применялся для изучения трансмембранной диффузии малых молекул через липидные бислои, имитирующие клеточные мембраны. Апробирована методика изучения транспорта молекул через бислои с использованием метода управляемой молекулярной динамики на примере ряда низкомолекулярных соединений.

Ключевые слова: биофизика, молекулярная динамика, молекулярное моделирование.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (госконтракт №07.514.11.4127) и Российского фонда фундаментальных исследований (Грант № 12-04-31934)

Введение

Моделирование мембранных систем методом молекулярной динамики (МД) сопряжено с рядом сложностей: параметры и протокол молекулярной динамики должны быть подобраны таким образом, чтобы адекватно воспроизводить структурные характеристики моделируемых бислоев [1]. Ограниченность множества бислоев, для которых экспериментально установлены структурные характеристики, дополнительно затрудняет разработку корректных протоколов для молекулярно - динамических исследований [2, 3]. В рамках работы при помощи методов молекулярного моделирования изучена динамика и основные физико-химические свойства липидных бислоев, имитирующих модельные клеточные мембраны. Рассматривались бислои, образованные молекулами липидов различной длины, как насыщенные, так и ненасыщенные, в том числе со смешанным липидным составом, что позволило исследовать влияние липидного состава на структурно-функциональные характеристики бислоя.

С помощью метода управляемой молекулярной динамики изучен транспорт молекул через бислои на примере набора пробных молекул. В рамках подхода произведена оценка ряда кинетических параметров проникновения молекул, проведено сравнительное изучение эффективных вязкостных характеристик различных мембранных структур и диффузионных свойств малых молекул.

Методы

Для изучения динамики и проницаемости мембранных структур использовался метод молекулярной динамики [4, 5]. Суть метода заключается в представлении о многоатомной молекулярной системе, в которой все атомы (или группы атомов) являются взаимодействующими материальными точками и их динамическое поведение описывается уравнениями классической механики. С использованием современной вычислительной техники данный метод позволяет исследовать системы размером в несколько миллионов частиц порядка на временном диапазоне до нескольких сотен наносекунд и более.

Поведение каждой частицы описывается классическим уравнением движения:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i, \quad \vec{F}_i = \frac{\partial U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)}{\partial \vec{r}_i}$$

Здесь i — номер атома, n — количество атомов в системе, m_i — масса атома, \vec{r}_i — радиус-вектор атома, \vec{F}_i — равнодействующая сил, действующих на атом, U — потенциальная энергия системы.

Таким образом, действующая на частицу сила определяется через градиент функции потенциальной энергии, который включает в себя сумму всех взаимодействий в системе:

$$U(r) = \sum_{i,j} U_{ij}^b(b_{ij}) + \sum_{i,j,k} U_{ijk}^v(\theta_{ijk}) + \sum_{i,j,k,l} U_{ijkl}^a(\phi_{ijkl}) + \sum_{i \neq j} [U_{ij}^c(r_{ij}) + U_{ij}^{vdw}(r_{ij})]$$

Здесь первые три слагаемых представляют валентные взаимодействия, а последние два представляют силы, существующие между парами валентно не связанных атомов: электростатические и Ван-дер-Ваальсовы силы (Рисунок 1 - а).

В целом, общий вид функции потенциальной энергии практически не изменяется в разных силовых полях, однако параметризация сил может различаться. Система уравнений в общем случае не может быть решена аналитически, поэтому для поиска приближенного решения применяются численные методы. В данной работе использовался метод Верле [6] с силовым полем Amber-99 [7]. Шаг интегрирования уравнений движения составлял 1 фс.

Для исследований были отобраны представляющие интерес с биологической точки зрения молекулы липидов, в том числе как мажорные компоненты биологических мембран: 1-пальмитоил-2-олеил-sn-глицеро-3-фосфатидилхолин (ПОФХ), 1,2-дипаль-митоил-sn-глицеро-3-фосфатидилхолин (ДПФХ), так и минорный компонент, имеющий значение для функционального состояния мембраны (1,3-(1-стеароил-2-пальмитоил-sn-глицеро-3-фосфатидил)-глицерин, кардиолипин, КЛ). В работе изучались модели мембранных систем, составленные из различных липидов в следующих пропорциях:

- 1) ПОФХ-ДПФХ-КЛ в соотношении 4:4:2

2) ПОФХ-ДПФХ в соотношении 1:1

3) ПОФХ

Использовались периодические граничные условия. Сборка молекулярной структуры производилась при помощи оригинального программного обеспечения. Начальная структура соответствовала перпендикулярному положению оси наибольшей протяженности молекул липидов относительно плоскости мембраны. Молекулы липидов предварительно вращались вокруг своей длинной оси на случайный угол (Рисунок 1 - б).

Парциальные заряды и силовые константы для малых молекул и молекул липидов вычислялись с использованием пактов квантово-химических расчетов Firefly (PC GAMESS). Применялся неограниченный метод Хартри-Фока (UHF6 - 31G) [8] и метод Малликена. Отрицательный заряд молекулы кардиолипина величиной в два заряда электрона компенсировался добавлением в воду ионов натрия. Использовалась модель воды TIP3P [9, 10]. Валентные связи и углы в молекуле воды не фиксировались. Радиус обрезания для кулоновских и Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий составлял от 16 до 20 Å в зависимости от типа мембраны и размера системы. Для поддержания условий постоянства температуры использовалась виртуальная столкновительная среда [11] с массой виртуальных частиц 1 а.е.м. и средней частотой столкновений с атомами системы 10 ps^{-1} , для поддержания условий постоянного давления использовался баростат Берендсена [12] с частотой от 0.1 до 1 ps^{-1} .

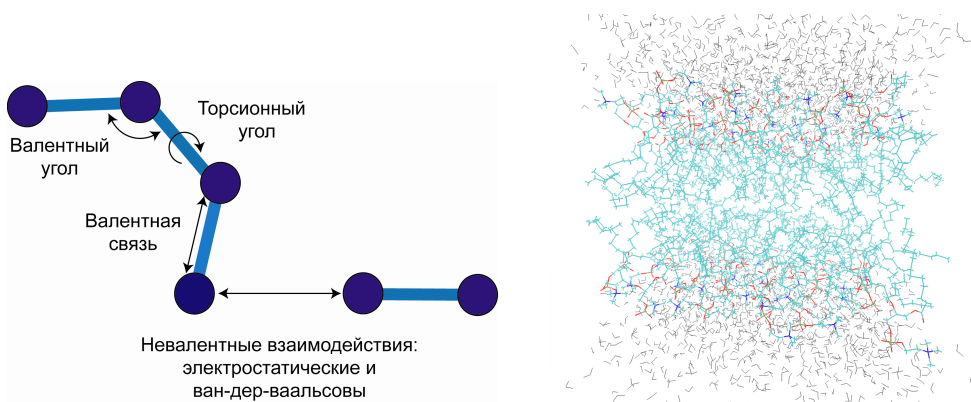


Рис. 1: а) Типы взаимодействий атомов в методе молекулярной динамики. б) Вид молекулярной системы.

Подготовленные системы подвергались многоступенчатой релаксации. На первом этапе проводился «отжиг» системы - моделирование в NVT ансамбле, при температуре 1000 К, с фиксированными положениями атомов фосфора в головах липидов, с длиной траектории не более 200 пс. Полученные таким образом модели мембранных систем были лишены избыточной структурированности и имели

| Система | Средняя удельная площадь, Å^2 | Латеральное давление, бар |
|---------|--|---------------------------|
| 1 | $78,0 \pm 5.5$ | -242 |
| 2 | $65,4 \pm 1.5$ | -300 |
| 3 | $66,8 \pm 3.7$ | -265 |

Таблица 1: Величина приложенного расклинивающего давления в исследуемых системах.

большое количество кинков в области хвостов. Затем полученная система гидратировалась молекулами воды таким образом, что на молекулу липида приходилось 34-43 молекулы растворителя (для большинства липидов величиной полной гидратацией считается не менее 27 молекул воды на липид [13]). Затем проводилась дальнейшая релаксация системы в течение 500 пс в NPT ансамбле при температуре 300-1000 К и набор рабочего участка траектории длиной не менее 2 нс при температуре 300 К. При моделировании мембранных систем в условиях постоянного давления для поддержания средней удельной площади на молекулу липида в соответствии с известными экспериментальными оценками, к системам прилагалось отрицательное (расклинивающее) давление в латеральной плоскости (таблица 1).

Необходимость использования анизотропного баростатирования для поддержания площади расчетной ячейки в соответствии с известными экспериментальными данными обусловлена, по-видимому, эффектами поверхностного натяжения, и возможными погрешностями параметризации силового поля и протокола вычислительного эксперимента. Необходимо отметить, что эта проблема неоднократно обсуждалась ранее [14, 15, 16] и в целом считается допустимым при моделировании мембранных систем использование анизотропного баростатирования с различным значением компонентов давления в направлениях нормали к мембране и латеральной плоскости [8].

Для исследования процессов диффузии малых молекул через мембранные структуры использовался метод управляемой молекулярной динамики. Расчет проводился в периодических граничных условиях, при постоянных температуре и давлении (NPT – ансамбль). Было выбрано 10 пробных низкомолекулярных соединений, представляющих интерес с биологической точки зрения (таблица 2).

В стартовой конфигурации молекулы пенетранта помещались в водную среду на расстоянии порядка 10 Å от крайних атомов фосфора липидов мембраны. К пробным молекулам далее прикладывалась дополнительная постоянная сила \vec{F}_{ext} , действующая в направлении нормали к поверхности мембраны. Величина суммарной силы выбиралась равной 2 и 6 ккал/ $\text{Å} \cdot \text{моль}^{-1}$. Сила прикладывалась равномерно ко всем атомам пробной молекулы. Расчет траекторий проводился до первого полного прохода молекулы через мембрану. Во всех случаях радиус обрезания невалентных взаимодействий был достаточно мал, так что диффундирующие ма-

| № | Молекула | Хим. формула | Эфф. радиус (Å) |
|---|------------------------|---|-----------------|
| 1 | Вода (WAT) | H ₂ O | 1,93 |
| 2 | Аммиак (AMM) | NH ₃ | 2,15 |
| 3 | Кислород (OXY) | O ₂ | 2,23 |
| 4 | Формамид (FMD) | HCONH ₂ | 2,51 |
| 5 | Мочевина (UREA) | (NH ₂) ₂ CO | 2,62 |
| 6 | Этандиол (ETD) | C ₂ H ₄ (OH) ₂ | 2,81 |
| 7 | Этанол (ETL) | C ₂ H ₅ OH | 2,83 |
| 8 | Глицерол (GRL) | C ₃ H ₅ (OH) ₃ | 3,07 |
| 9 | Масляная кислота (BTA) | C ₃ H ₇ COOH | 3,32 |

Таблица 2: Рассматриваемые низкомолекулярные соединения и их химическое строение. Величины эффективных радиусов вычислялись исходя из известных значений молярной массы и плотности вещества конденсированной фазы.

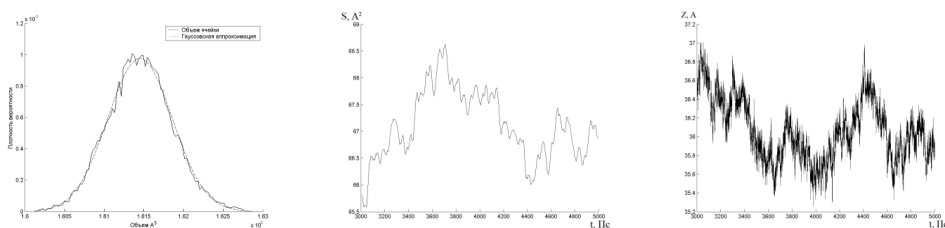


Рис. 2: а) Плотность вероятности объема (а), флуктуации площади ячейки б) и толщины (с) бислоя для системы 3.

лые молекулы не могли взаимодействовать со своими периодическими образами.

Результаты

Разработанный протокол моделирования позволяет моделировать бислои, основные физико-химические и структурные свойства которых соответствуют экспериментальным [2]. Флуктуации таких параметров бислоя, как площадь и объем ячейки имеют вид нормального распределения, что говорит о достижении локально-равновесного состояния (Рисунок 2).

Вычисленные в соответствии с теорией термодинамических флуктуаций значения коэффициента изотермического сжатия системы χ_T равны $2 \cdot 10^{-10}$, $2.16 \cdot 10^{-10}$, $2.13 \cdot 10^{-10} \text{ Па}^{-1}$ для систем 1, 2 и 3 соответственно, что близко к экспериментальным оценкам величины параметра в пределах от $1 \cdot 10^{-10}$ до $6 \cdot 10^{-10} \text{ Па}^{-1}$ [17]. Также для гидратированного бислоя были вычислены распределения электронной плотности вдоль нормали к поверхности мембраны. Карта распределения электронной плоскости дает информацию о порядке укладки атомов различ-

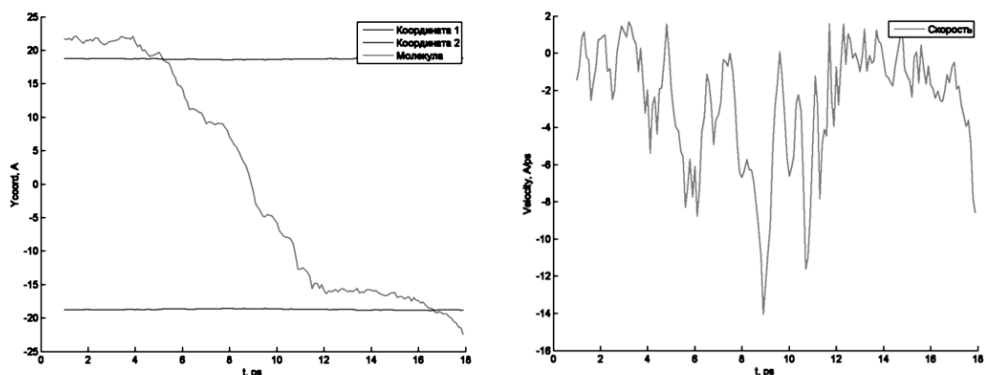


Рис. 3: Кинетика прохождения молекулы аммиака под действием силы $6 \text{ ккал}/\text{Å} \cdot \text{моль}^{-1}$ в направлении нормали к мембране через бислои системы 1. Слева показана зависимость положения молекулы по оси OY (нормали мембраны) от времени, горизонтальными линиями показаны границы липидного бислоя (усредненные координаты атомов фосфора). Справа – зависимость скорости перемещения молекулы от времени.

ных типов в бислое и также может быть получена в эксперименте. В целом полученный в расчетах характер распределения электронной плотности (не показано) находится в соответствии с экспериментальными оценками, что также является показателем реалистичности модели.

Для дополнительной верификации модели были вычислены коэффициенты латеральной диффузии липидов. Полученные значения от $2.2 \cdot 10^{-7}$ до $2.7 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2/\text{с}$ также находятся в согласии с рядом экспериментальных оценок (см. например [18]).

Процесс диффузии через липидные бислои происходит относительно медленно. На временах, доступных для моделирования (порядка сотен наносекунд), практически невозможно наблюдать спонтанную диффузию для соединений больше размера молекулы воды. При этом даже для малых молекул невозможно собрать достоверную статистику, достаточную для оценок средневзвешенных макроскопических характеристик, таких как коэффициент диффузии, коэффициент распределения вода-мембрана или статистической оценки профилей свободной энергии.

Для сравнительного изучения проницаемости мембран по отношению к пентрантам различной химической природы в данном исследовании использовался метод управляемой молекулярной динамики. В рамках данного подхода к молекулам прилагалась внешняя сила 2 и $6 \text{ ккал}/\text{Å} \cdot \text{моль}^{-1}$ по направлению нормали к мембране. Под действием силы молекулы проникают через мембрану, при этом смещение молекулы определяется в основном воздействием силы и вкладом тепловой диффузии можно пренебречь (Рисунок 3).

Для проведения сравнительного анализа, оценивался локальный коэффициент

трения γ как отношение величины приложенной силы $|\overrightarrow{F_{ext}}|$ к средней скорости $|\overrightarrow{v}|$ дрейфа, исходя из формулы коэффициента трения в жидкости. Далее рассчитывался сравнительный коэффициент эффективной микровязкости η среды используя формулу Стокса-Эйнштейна для коэффициента диффузии D .

$$\gamma = F_{ext}/v, \quad D = k_b T / \gamma = k_b T / 6\pi\eta r$$

Для расчета использовался эффективный радиус r молекулы в соответствии с таблицей 2, k_b – константа Больцмана.

Полученный коэффициент диффузии для кислорода $2.4 \cdot 10^{-5}$ см²/с для смешанной мембраны и $1.7 \cdot 10^{-5}$ см²/с для мембраны ПОФХ близок к коэффициенту диффузии кислорода в воде ($2 \cdot 10^{-5}$ см²/с при $T = 293$ К и $3.2 \cdot 10^{-5}$ см²/с при $T = 313$ К). Это согласуется с некоторыми экспериментальными данными для коэффициента диффузии кислорода в биологических мембранах, который согласно [19, 20, 21] лежит в пределах от $1.5 \cdot 10^{-5}$ см²/с до $4.7 \cdot 10^{-5}$ см²/с.

Вместе с тем, необходимо отметить, что поскольку на таком масштабе ньютоновское приближение среды для бислоя липидов представляется некорректным (ниже это дополнительно подтверждается различными вычисленными значениями эффективной микровязкости при разных величинах приложенной силы). Вычисленные значения следует трактовать лишь как выраженную в единицах вязкости количественную характеристику вязкостных свойств бислоя, которая вычислена в рамках величин приложенных сил. Результаты моделирования усреднялись по результатам 4 экспериментов (Таблица 3).

На рисунке 4 представлена вычисленная зависимость эффективной средней микровязкости исследуемых бислоев от эффективного радиуса пробной молекулы для величины силы 6 ккал/Å · моль⁻¹. В среднем более высокая эффективная вязкость мембраны ПОФХ (система 3) объясняется по-видимому тем, что мембрана находится в квазикристаллическом состоянии. Наличие большого количества двойных связей в хвостах КЛ и ПОФХ в системе 1 вероятно приводит к уменьшению упорядоченности бислоя и разрыхлению структуры мембраны.

| | $\bar{\tau}$, пс | | эфф. коэффициент трения $\cdot 10^9$ г/сек | | эфф. коэффициент диффузии $\cdot 10^7$ см ² /сек | | эфф. вязкость, сПз | |
|------|-------------------|-----|---|------|--|-----|--------------------|------|
| | 1 | 3 | 1 | 3 | 1 | 3 | 1 | 3 |
| WAT | 14 | 22 | 1.3 | 2.0 | 324 | 250 | 0.37 | 0.56 |
| ETL | 53 | 64 | 5.1 | 6.0 | 87 | 94 | 0.96 | 1.13 |
| AMM | 13 | 31 | 1.2 | 2.9 | 364 | 243 | 0.30 | 0.72 |
| BTA | 129 | 231 | 12.4 | 21.9 | 38 | 42 | 1.99 | 3.50 |
| FMD | 58 | 46 | 5.6 | 4.3 | 96 | 100 | 1.18 | 0.90 |
| GRL | 232 | 434 | 22.3 | 41.9 | 22 | 11 | 3.85 | 7.24 |
| ETD | 101 | 136 | 9.6 | 12.8 | 44 | 37 | 1.82 | 2.41 |
| UREA | 95 | 98 | 9.1 | 9.1 | 57 | 55 | 1.84 | 1.85 |
| OXY | 23 | 33 | 2.2 | 3.1 | 242 | 172 | 0.53 | 0.73 |

Таблица 3: Оценка характерных времен и кинетических характеристик форсированной диффузии пробных молекул через бислои систем 1 и 3 под действием постоянной силы $6 \text{ ккал}/\text{\AA} \cdot \text{моль}^{-1}$

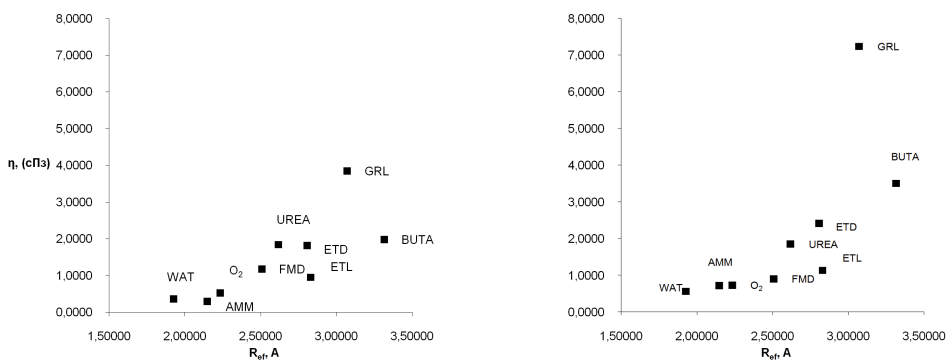
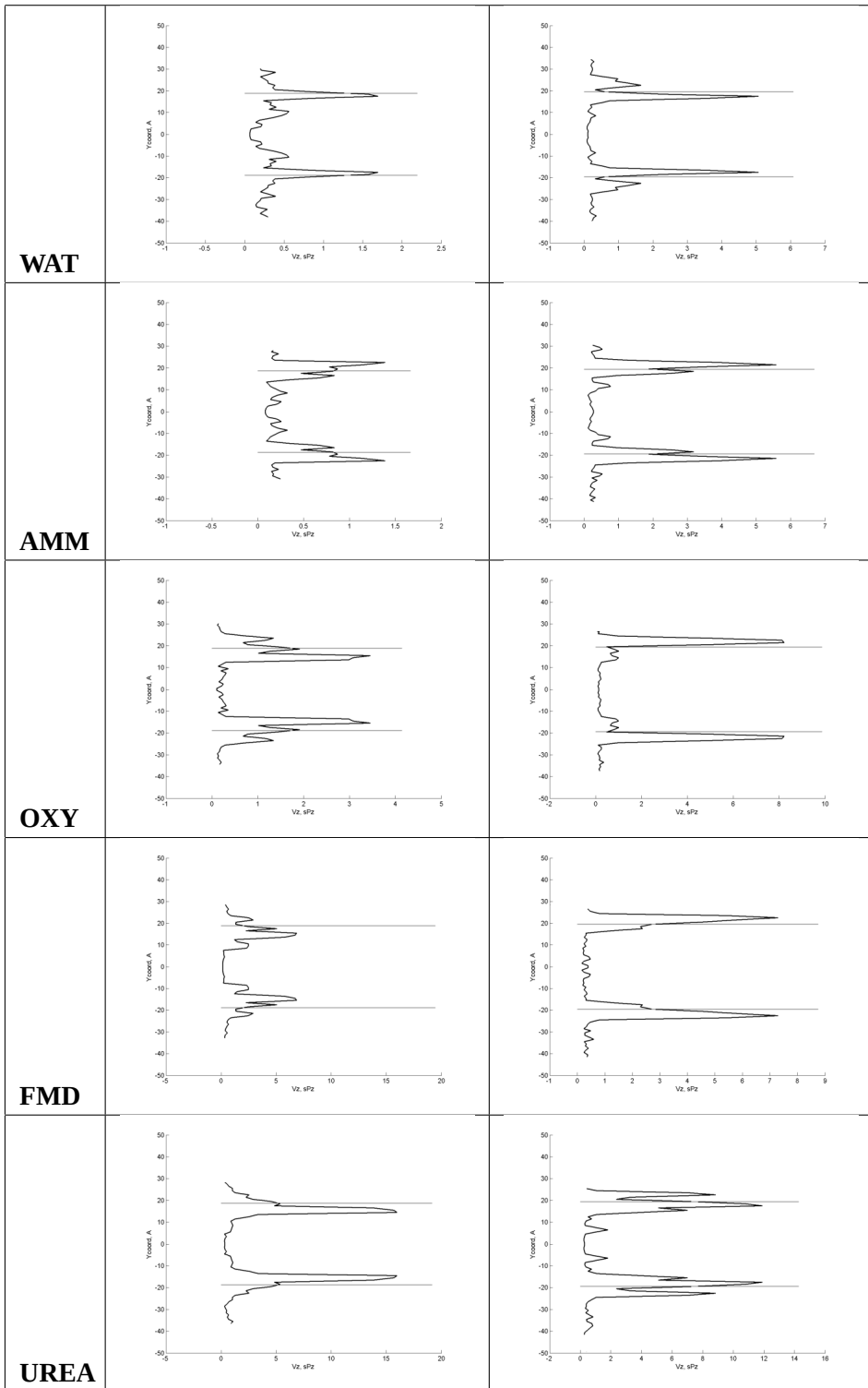


Рис. 4: а) Зависимость эфф. микровязкости от эффективного радиуса R_{ef} пробных молекул а) — в системе 1 б) - в системе 3, обозначения молекул в соответствии с таблицей 2.

Неоднородность микровязкости в разных слоях по отношению к уровню нормали бислоя вычислялась путем измерения средней скорости, с которой молекула проходила каждый участок бислоя с заданным значением силы. Далее в соответствии с формулой Стокса-Эйнштейна вычислялся локальный коэффициент трения, который далее выражался в терминах эффективной микровязкости. Полученные в результате распределения величины эффективной микровязкости бислоя на различной глубине по отношению к нормали к поверхности мембраны приведены на рисунке 5.



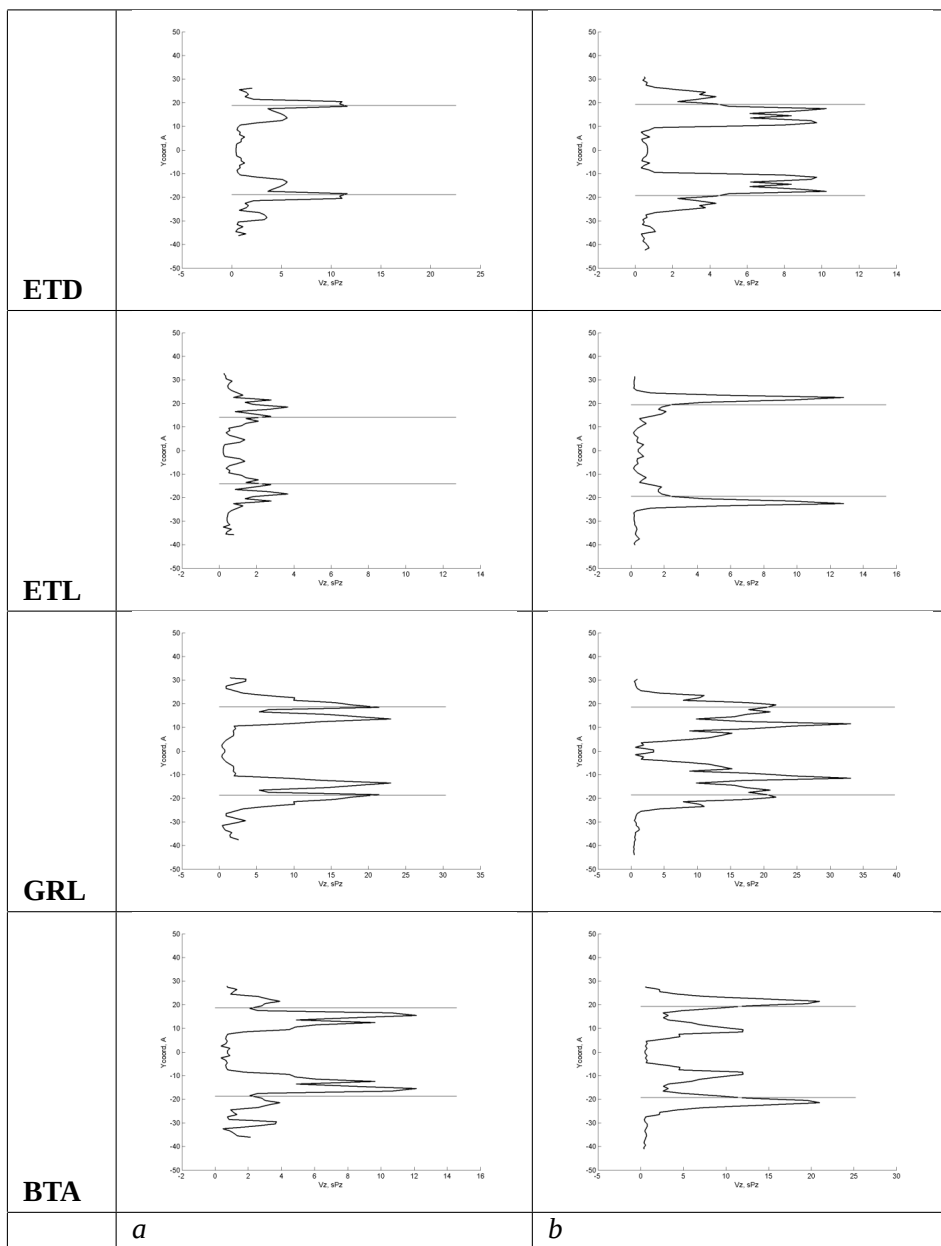


Рис. 5: Вычисленное распределение анизотропной микровязкости бислоев для различных низкомолекулярных соединений вдоль нормали к поверхности бислоя: (а) – для системы 1 (б) – для системы 3. Горизонтальными линиями показано усредненное положение атомов фосфора липидов бислоя.

Сравнительное изучение проницаемости мембран для различных молекул показывает, что наибольшие различия для эффективной микровязкости в зависимости от химической природы молекулы-пенетранта наблюдаются в области полярных липидных голов. Гидрофобная центральная часть бислоя оказывается менее вязкой и менее чувствительной к химической природе молекулы, чем область голов фосфолипидов. По-видимому, область полярных голов фосфолипидов играет роль своеобразного фильтра. Сопротивление внутренней области бислоя значительно ниже и мало чувствительно к природе проникающих молекул, но этот гидрофобный слой существенно влияет на коэффициент распределения молекул и на коэффициент проницаемости мембраны. Необходимо отметить также, что рассчитанная эффективная вязкость в толще воды оказывается также менее чувствительной к химической природе малой молекулы и для большинства соединений вычисленное значение находится в пределах 0.2 – 0.5 сПз, что в 2-5 раза меньше известных экспериментальных значений, но согласуется с оценками вязкости для используемой модели воды ТРЗР [23].

Было проведено сравнение экспериментальных данных по проницаемости малых молекул через бислои липидов с получаемыми в МД эксперименте коэффициентами диффузии. Проницаемость вычислялась исходя из выражения для проницаемости мембраны

$$P = K \cdot D / \Delta x$$

Где P – проницаемость, K – коэффициент распределения вода-мембрана, D – коэффициент диффузии, Δx – толщина мембраны. Коэффициент межфазного распределения оценивался исходя из экспериментальных данных для систем вода-гексадекан. Данные, приведенные в таблице 4 позволяют оценить соответствие вычисленных величин и экспериментальных значений проницаемости.

В целом, имеется определенное согласие вычисленных и экспериментально измеренных значений проницаемости для рассматриваемых молекул. В частности, это наблюдается при сравнении расчетных и экспериментальных коэффициентах проницаемости для этандиола и формамида. Экспериментально измерено более высокое значение P формамида при сравнимых значениях K . Это говорит о более высоком значении коэффициента диффузии для формамида, что также наблюдается при сравнении вычисленных значений D .

Выводы

Вычисляемые таким способом кинетические параметры проникновения молекул через липидные бислои позволяют с достаточно хорошей точностью изучать процессы диффузии в мембранах различного липидного состава для лигандов различной химической природы, а также на микроуровне проводить сравнительное изучение эффективных вязкостных характеристик различных мембранных структур

| Молекула | Коэффициент диффузии $\cdot 10^7$ см ² /сек | | $K_{hc} \cdot D / \Delta x \cdot 10^3$ (см/сек) | | $P \cdot 10^3$ (см/сек) |
|----------|--|-----|---|--------|-------------------------|
| | 1 | 3 | 1 | 3 | |
| WAT | 324 | 250 | 3,4 | 2,6 | 3,4 (*) |
| FMD | 97 | 100 | 0,19 | 0,20 | 0,1 (*) |
| GRL | 22 | 11 | 0,011 | 0,0056 | 0,0054 (*) |
| ETD | 44 | 37 | 0,19 | 0,16 | 0,088 (*) |
| UREA | 57 | 55 | 0,0040 | 0,0039 | 0,004 (*) |
| ETL | 87 | 94 | | | |
| AMM | 364 | 243 | 200 | 134 | 130 (*) |
| BUTA | 38 | 42 | 83 | 91 | 95 (*) |

Таблица 4: Расчетные значения коэффициентов диффузии для систем 1 и 3 и экспериментально известные значения проницаемости (* для бислоев яичного фосфатидилхолина, по [22])

и диффузионных свойств малых молекул, что труднодоступно в *in vitro* экспериментах. Вычисленные значения эффективной микровязкости мембраны зависит от размера молекулы-пенетранта и выше для пенетрантов большего радиуса.

Микровязкость значительно различается в разных частях бислоя. Наибольшие различия в сопротивлении проникновению лигандов через мембрану имеют место в области липидных голов. Этот слой играет, по-видимому, роль своеобразного фильтра. При этом сопротивление в гидрофобной сердцевине бислоя менее чувствительно к природе проникающих молекул. При этом разумно предположить, что этот слой влияет на коэффициент распределения.

Полученный в результате МД экспериментов в полноатомном приближении ряд проницаемостей для молекул – пенетрантов по мере увеличения выглядит следующим образом: глицерин, мочевины, этандиол, формамид, вода, масляная кислота, аммиак, кислород, что в целом согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Антонов М.Ю., Шайтан А.К., Боздаганян М.Е., Орехов Ф.С., Шайтан К.В. Использование параллельных вычислений для решения задач молекулярного моделирования. The application of parallel calculations for the study of the dynamics of biomacromolecules using molecular modeling. Труды Международных конференций по математическому моделированию. Якутск: Издательство Сфера, 2012, ISBN 978-5-91794-049-6, с.263-278.

- [2] Levtsova OV, Antonov MY, Naumenkova TV, Sokolova OS Interaction of zervamicin IIB with lipid bilayers. Molecular dynamics study. *Comput. Biol. Chem.* 2011 Feb;35(1):pp.34-39.
- [3] К.В.Шайтан, М.Ю.Антонов, Е.В.Турлей, О.В.Левцова, К.Б.Терешкина, И.Н.Николаев Молекулярная динамика и диффузия в биомембранах с различным липидным составом. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Под ред. В.А.Иванова, А.Л.Рабиновича и А.Р.Хохлова, М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009, ISBN 978-5-397-01119-8, с. 491-503.
- [4] Турлей Е.В., Шайтан К.В., Балабаев Н.К. Молекулярная динамика гидратированных углеводородных мембранных структур. *Журн. Физ. Химии*, 8 (Т. 79), 2005, 1448-1456.
- [5] Wataru S., Keiko S., Terujiko B., Masuhiro M. Molecular Dynamics Study of Bipolar Tetraether Lipid Membranes. *Biophys. J.*, V. 89, 2005, 3195-3202.
- [6] Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. *Phys. Rev.*, 159, 1967, 98-103.
- [7] Cornell WD, Cieplak P, Bayly CI, Gould IR, Merz KM Jr, Ferguson DM, Spellmeyer DC, Fox T, Caldwell JW, Kollman PA (1995). "A Second Generation Force Field for the Simulation of Proteins, Nucleic Acids, and Organic Molecules". *J. Am. Chem. Soc.* 117: 5179-5197.
- [8] Турлей Е.В., Шайтан К.В., Балабаев Н.К. Молекулярная динамика гидратированного бислоя пальмитоилолеоилфосфатидилхолина в столкновительном термостате. *Биол. мембраны*, 22, 2005, 519-530.
- [9] Jorgensen W.L., Chandrasekhar J., Madura J.D. Comparison of simple potential functions for simulating liquid water. *J. Chem. Phys.*, 79, 1983, 926-935.
- [10] Feller S.E., Pastor R.W., Rojnuckarin A., Bogusz S., Brooks B.R. Effect of electrostatic force truncation on interfacial and transport properties of water. *J. Phys. Chem.*, 100, 1996, 17011-17020.
- [11] Lemak A.S., Balabaev N.K. Molecular dynamics simulation of a polymer chain in solution by collisional dynamics method. *J. Comput. Chem.*, 17, 1996, 1685-1695.
- [12] Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. Molecular dynamics with coupling to an external bath. *J. Chem. Phys.*, 81, 1984, 3684-3690.
- [13] Niebylski C.D., Salem N. A calorimetric investigation of a series of mixed-chain polyunsaturated phosphatidylcholines: effect of sn-2 chain length and degree of unsaturation. *Biophys. J.*, 67, 1994, 2387-2393.

- [14] Heller H., Schaefer M., Schulten K. Molecular dynamics simulation of a bilayer of 200 lipids in the gel and in the liquid crystal phases. *J. Phys. Chem.*, 97, 1993, 8343–8360.
- [15] Feller S.E., Pastor R.W. Constant surface tension simulations of lipid bilayers: the sensitivity of surface areas and compressibilities. *J. Chem. Phys.*, 111, 1999, 1287.
- [16] Dolan E.A., Venable R.M., Pastor R.W., Brooks B.R. Simulations of membranes and other interfacial systems using P21 and P₆ periodic boundary conditions. *Biophys. J.*, 82, 2002, 2317–2325.
- [17] Braganza L.F., Worcester D.L. Structural changes in lipid bilayers and biological membranes caused hydrostatic pressure. *Biochemistry*, 25, 1986, 7484–7488.
- [18] Filippov A., Oradd G., Lindblom G. The effect of cholesterol on the lateral diffusion of phospholipids in oriented bilayers. *Biophys. J.*, 84, 2003, 3079–3086.
- [19] Lavi A., Weitman H., Holmes R.T., Smith K.M., Ehrenberg B. The depth of porphyrin in a membrane and the membrane's physical properties affect the photosensitizing efficiency. *Biophys. J.*, 82, 2002, 2101–2110.
- [20] Roslaniec M., Weitman H., Freedman D., Mazur Y., Ehrenberg B. Liposome binding constants and singlet oxygen quantum of hypericin, tetrahydroxy helianthone and their derivatives: studies in organic and biological media. *J. Photochem. Photobiol. B*, 57, 2000, 149–158.
- [21] Merx M.W., Flugel U., Stumpe T., Gudecke A., Decking U.K., Schrader J. Myoglobin facilitates oxygen diffusion. *FASEB J.*, 15, 2001, 1077–1079.
- [22] Walter A., Gutknecht J. Permeability of small nonelectrolytes through Lipid Bilayer Membranes. *J. Membrane Biol.*, 90, 1986, 207–217.
- [23] Mahoney M.W., Jorgensen W.L. Diffusion constant of the TIP5P model of liquid water. *J. Chem. Phys.*, 114, 2001, 363–366.

Устойчивые схемы для задач конвекции-диффузии-реакции

Афанасьева Н. М.

Северо-Восточный федеральный университет, Якутск, Россия;

`nm.afanaseva@s-vfu.ru`

Аннотация

Рассматриваются разностные схемы для нестационарных задач конвекции-диффузии-реакции. Строятся безусловно устойчивые схемы для задач с конвективными слагаемыми в дивергентном и недивергентном виде. В построении устойчивых схем используется подход, который идейно примыкает к так называемым нестандартным схемам. Условия устойчивости схем исследуются в различных нормах сеточных функций.

Ключевые слова: задачи конвекции-диффузии-реакции, устойчивые схемы, логарифмическая норма.

Введение

В математическом моделировании проблем механики сплошной среды отдельного внимания заслуживают задачи конвекции-диффузии-реакции. Дополнительные младшие слагаемые параболического уравнения, которые описывают химические реакции, приводят к тому, что норма решения однородного уравнения может экспоненциально расти со временем. Такое поведение решения приводит к тому, что мы должны рассматривать ρ -устойчивость разностных схем [1, 2, 3].

Различная природа конвективного и диффузионного переносов, процессов реакции может быть учтена при выборе аппроксимаций по времени. Наиболее ярко неоднородность аппроксимаций по времени выражена при использовании явно- неявных схем, когда часть слагаемых оператора задачи аппроксимируется явными соотношениями, а часть — неявными. Явно-неявные схемы широко используются при численном решении задач конвекции-диффузии [4]. С учетом подчиненности оператора конвективного переноса диффузионному можно показать [5] безусловную устойчивость явно-неявных схем для нестационарных задач конвекции-диффузии. Подобные технологии применяются и при рассмотрении задач диффузии-реакции. В этом случае (смотри, например, [6]) диффузионный перенос остается неявным, а явные аппроксимации используются для учета реакции (источниковые члены). В работе [7] для построения безусловно устойчивых в сеточных гильбертовых пространствах схем для задач конвекции-диффузии-реакции,

одна часть оператора реакции берется с нижнего слоя по времени, а другая часть — с верхнего.

Здесь к построению безусловно устойчивых схем для приближенного решения нестационарных задач конвекции-диффузии-реакции используется подход, который идейно примыкает к нестандартным схемам. Некоторые примеры использования нестандартных аппроксимаций по времени можно найти, например, в [8, 9]. В работе [10] построены безусловно устойчивые схемы для нестационарных задач конвекции-диффузии. Условия устойчивости различных схем для нестационарных задач конвекции-диффузии с применением логарифмической нормы рассмотрены в [5, 11].

Задачи конвекции-диффузии-реакции

Рассмотрим одномерную задачу, когда ищется решение краевой задачи для уравнения конвекции-диффузии-реакции с конвективным переносом в недивергентной форме:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + r(x, t)u + v(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = f(x, t), \quad (1)$$

при $0 < x < l$, $t > 0$ или с конвективным переносом в дивергентной форме:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + r(x, t)u + \frac{\partial}{\partial x} (v(x, t)u) - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = f(x, t). \quad (2)$$

На коэффициент реакции $r(x, t)$ накладываются ограничения

$$r(x, t) \geq \mu, \quad 0 < x < l, \quad \mu = \text{const} < 0. \quad (3)$$

Уравнения дополним простейшими однородными граничными условиями Дирихле:

$$u(0, t) = 0, \quad u(l, t) = 0, \quad t > 0. \quad (4)$$

Кроме того, задается начальное условие:

$$u(x, 0) = u^0(x), \quad 0 < x < l. \quad (5)$$

Наиболее просто априорные оценки для задач (1), (3)-(5) и (2)-(5) получаются при введении новой искомой переменной. Пусть:

$$u(x, t) = \exp(-\mu t)z(x, t). \quad (6)$$

Тогда для $z(x, t)$ из (1), (4)-(5) получим задачу

$$\frac{\partial z}{\partial t} + (r(x, t) - \mu)z + v(x, t) \frac{\partial z}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial z}{\partial x} \right) = \exp(\mu t)f(x, t), \quad (7)$$

$$z(0, t) = 0, \quad z(l, t) = 0, \quad t > 0,$$

$$z(x, 0) = u^0(x), \quad 0 < x < l.$$

Аналогично для случая (2), (4)-(5).

Соответствующие априорные оценки для рассматриваемых задач выписываются в пространствах $L_\infty(0, l)$ and $L_1(0, l)$, нормы в которых есть

$$\|v\|_\infty = \max_{0 < x < l} |v(x)|, \quad \|v\|_1 = \int_0^l |v(x)| dx.$$

Для решения задачи с уравнением (7) верна оценка:

$$\|z(x, t)\|_\infty \leq \|u^0(x)\|_\infty + \int_0^t \exp(\mu\theta) \|f(x, \theta)\|_\infty d\theta.$$

Отсюда, принимая во внимание (6), приходим к оценке

$$\|u(x, t)\|_\infty \leq \exp(-\mu t) \|u^0(x)\|_\infty + \int_0^t \exp(-\mu(t - \theta)) \|f(x, \theta)\|_\infty d\theta \quad (8)$$

и аналогично, для решения задачи (2), (4)-(6) получим

$$\|u(x, t)\|_1 \leq \exp(-\mu t) \|u^0(x)\|_1 + \int_0^t \exp(-\mu(t - \theta)) \|f(x, \theta)\|_1 d\theta. \quad (9)$$

Априорные оценки служат ориентиром при рассмотрении дискретных задач.

Сеточная задача

Нестационарную задачу (1), (4)-(5) запишем в виде дифференциально-операторного уравнения

$$\frac{du}{dt} + \mathcal{A}u = f(t), \quad \mathcal{A} = \mathcal{A}(t) = \mathcal{R}(t) + \mathcal{C}(t) + \mathcal{D}, \quad (10)$$

и условия

$$u(0) = u^0. \quad (11)$$

Здесь $\mathcal{R}(t)$ — оператор реакции,

$$\mathcal{R}u = r(x, t)u;$$

$\mathcal{C}(t)$ — оператор конвективного переноса:

$$\mathcal{C}u = v(x, t) \frac{\partial u}{\partial x};$$

а \mathcal{D} — оператор диффузионного переноса:

$$\mathcal{D}u = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right).$$

На отрезке $[0, l]$ введем сетку

$$\bar{\omega} \equiv \omega \cup \partial\omega = \{x \mid x = x_i = ih, \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad Nh = l\},$$

где ω — множество внутренних узлов:

$$\omega = \{x \mid x = x_i = ih, \quad i = 1, 2, \dots, N - 1, \quad Nh = l\}.$$

Проведем аппроксимацию по пространству. Для разностного оператора диффузии положим, например

$$\begin{aligned} Dw = & -\frac{1}{h^2} k(x + 0.5h)(w(x + h, t) - w(x, t)) \\ & + \frac{1}{h^2} k(x - 0.5h)(w(x, t) - w(x - h, t)), \quad x \in \omega, \end{aligned} \quad (12)$$

при

$$w(x, t) = 0, \quad x \in \partial\omega. \quad (13)$$

Аппроксимация членов конвективного переноса проводится при задании $v(x, t)$ в полусельных узлах сетки $\bar{\omega}$ с учетом (13). Для операторов конвективного переноса в недивергентной форме (уравнение (1)) положим

$$\begin{aligned} Cw = & \frac{1}{2h} v(x + 0.5h, t)(w(x + h, t) - w(x, t)) \\ & + \frac{1}{2h} v(x - 0.5h, t)(w(x, t) - w(x - h, t)), \quad x \in \omega. \end{aligned} \quad (14)$$

Аналогичная аппроксимация второго порядка по h для оператора конвективного переноса в дивергентной форме (уравнение (2)) приводит к

$$\begin{aligned} Cw = & \frac{1}{2h} v(x + 0.5h, t)(w(x + h, t) + w(x, t)) \\ & - \frac{1}{2h} v(x - 0.5h, t)(w(x, t) + w(x - h, t)), \quad x \in \omega. \end{aligned} \quad (15)$$

А для R положим:

$$Rw = r(x, t)w(x, t), \quad x \in \omega. \quad (16)$$

После аппроксимации по пространству приходим к задаче Коши:

$$\frac{dw}{dt} + Aw = f(t), \quad 0 < t < T, \quad (17)$$

$$w(0) = u^0, \quad (18)$$

в которой $A = R + C + D$.

Устойчивость двухслойных схем

Сначала получим достаточные условия устойчивости двухслойной разностных схем для задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. После этого эти общие условия конкретизируем на примере модельных уравнений конвекции-диффузии-реакции с конвективными слагаемыми в недивергентной и дивергентной форме.

Рассмотрим следующую систему линейных обыкновенных уравнений первого порядка

$$\frac{dw_i}{dt} + \sum_{j=1}^m a_{ij}(t)w_j = \phi_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (19)$$

Полагая $w = w(t) = \{w_1, w_2, \dots, w_m\}$, $A = [a_{ij}]$, запишем (19) в матричном (операторном) виде

$$\frac{dw}{dt} + A(t)w = \phi(t). \quad (20)$$

Будем строить разностные схемы для приближенного решения задачи Коши, когда (20) рассматривается при $t > 0$ и начальных условиях

$$w(0) = u^0. \quad (21)$$

Нас будет интересовать устойчивость разностного решения задачи (20), (21) в L_∞ и L_1 . Для нормы вектора и согласованной с ней нормы матрицы [12] в L_∞ и L_1 имеем

$$\|w\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} |w_i|, \quad \|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^m |a_{ij}|, \quad (22)$$

$$\|w\|_1 = \sum_{i=1}^m |w_i|, \quad \|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq m} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|. \quad (23)$$

Задачу (20), (21) будем рассматривать при условии, что диагональные элементы матрицы A неотрицательны и имеется диагональное преобладание по строкам или столбцам, т.е. справедливо

$$a_{ii} \geq \sum_{i \neq j=1}^m |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (24)$$

(нестрогое диагональное преобладание по строкам), либо имеет место

$$a_{ii} \geq \sum_{i \neq j=1}^m |a_{ji}|, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (25)$$

(нестрогое диагональное преобладание по столбцам).

Логарифмическая норма матрицы [13, 14] A есть число

$$\mu[A] = \lim_{\delta \rightarrow 0+} \frac{\|E + \delta A\| - 1}{\delta}.$$

Для логарифмической нормы матрицы в L_∞ (согласованной с (22)) и в L_1 (согласованной с (23)) имеют место выражения

$$\mu_\infty[A] = \max_{1 \leq i \leq m} \left(a_{ii} + \sum_{i \neq j=1}^m |a_{ij}| \right),$$

$$\mu_1[A] = \max_{1 \leq j \leq m} \left(a_{jj} + \sum_{j \neq i=1}^m |a_{ij}| \right).$$

В силу ограничений (24), (25) в задаче Коши (20), (21) для логарифмической нормы матрицы $-A$ имеем

$$\mu[-A] \leq 0 \quad (26)$$

в соответствующем пространстве (в L_∞ при выполнении (24) и в L_1 — при (25)).

Из свойств логарифмической нормы [13, 15] отметим следующие:

1. $\mu[cA] = c\mu[A]$, $c = \text{const} \geq 0$;
2. $\mu[cE + A] = c + \mu[A]$, $c = \text{const}$;
3. $\|Aw\| \geq \max\{-\mu[-A], -\mu[A]\} \|w\|$.

Свойство 3 позволяет получить легко вычисляемую по элементам матрицы оценку нормы Aw снизу. Такая оценка комбинируется с обычной оценкой нормы Aw сверху: $\|Aw\| \leq \|A\| \|w\|$.

Построим и исследуем на устойчивость разностную схему для приближенного решения задачи (20), (21). Обозначим приближенное решение на момент времени $t^n = n\tau$, τ — шаг по времени, через y^n и запишем двухслойную схему с весами:

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} + A(\sigma y^{n+1} + (1 - \sigma)y^n) = \varphi^n, \quad (27)$$

где, например, $A = A(\sigma t^{n+1} + (1 - \sigma)t^n)$, при начальном условии

$$y^0 = u^0. \quad (28)$$

Достаточные условия устойчивости разностной схемы (27), (28) формулируются в виде следующего утверждения.

Теорема. Для задачи Коши (20), (21) с матрицей A удовлетворяющей условиям (24) (или (25)), разностная схема с весами (27), (28) безусловно устойчива при $\sigma = 1$ и условно устойчива при $0 \leq \sigma < 1$ в L_∞ (в L_1), если

$$\tau \leq \frac{1}{1 - \sigma} \left(\max_{1 \leq i \leq m} a_{ii} \right)^{-1}. \quad (29)$$

При этом для разностного решения верна априорная оценка

$$\|y^{n+1}\| \leq \|u^0\| + \sum_{k=0}^n \tau \|\varphi^k\|. \quad (30)$$

Доказательство. Из (27) следует

$$(E + \sigma\tau A)y^{n+1} = (E - (1 - \sigma)\tau A)y^n + \tau\varphi^n$$

и тем самым

$$\|(E + \sigma\tau A)y^{n+1}\| \leq \|(E - (1 - \sigma)\tau A)y^n\| + \tau\|\varphi^n\|. \quad (31)$$

Для левой части неравенства (31) в силу отмеченных выше свойств логарифмической нормы и с учетом (26) имеем

$$\begin{aligned} \|(E + \sigma\tau A)y^{n+1}\| &\geq -\mu[-E - \sigma\tau A] \|y^{n+1}\| \\ &= (1 + \sigma\mu[-A])\|y^{n+1}\| \geq \|y^{n+1}\|. \end{aligned}$$

Для первого слагаемого в правой части (31) получим

$$\|(E - (1 - \sigma)\tau A)y^n\| \leq \|E - (1 - \sigma)\tau A\| \|y^n\|.$$

Рассмотрим подробнее эту оценку при исследовании устойчивости в L_∞ . Случай L_1 изучается аналогично. Принимая во внимание (22) и условие диагонального преобладания (24), имеем

$$\begin{aligned} \|E - (1 - \sigma)\tau A\| &= \max_{1 \leq i \leq m} \left| 1 - (1 - \sigma)\tau \left(a_{ii} + \sum_{i \neq j=1}^m a_{ij} \right) \right| \\ &\leq \max_{1 \leq i \leq m} \left(|1 - (1 - \sigma)\tau a_{ii}| + (1 - \sigma)\tau \sum_{i \neq j=1}^m |a_{ij}| \right) \\ &\leq \max_{1 \leq i \leq m} (|1 - (1 - \sigma)\tau a_{ii}| + (1 - \sigma)\tau a_{ii}) \leq 1 \end{aligned}$$

при $0 \leq \sigma \leq 1$ и ограничениях на шаг по времени (29).

Подстановка в (31) дает неравенство

$$\|y^{n+1}\| \leq \|y^n\| + \tau\|\varphi^n\|,$$

из которого непосредственно вытекает искомая оценка устойчивости по правой части и начальным данным (30).

Установленные результаты применим для исследования устойчивости разностных схем для нестационарных задач конвекции-диффузии-реакции в недивергентной и дивергентной формах.

Безусловно устойчивые схемы

Аппроксимации по времени будем строить на основе трансформации задачи. Аналогично (6) в задаче (17), (18), (3) положим

$$w(x, t) = \exp(-\mu t)z(x, t), \quad x \in \omega.$$

Для $z(x, t)$ получим задачу

$$\frac{dz}{dt} + \tilde{A}(t)z = \exp(\mu t)\phi(t), \quad (32)$$

$$z(0) = u^0. \quad (33)$$

Для оператора \tilde{A} имеем представление

$$\tilde{A} = C + D + R - \mu E, \quad (34)$$

где E — единичный оператор. Дополнительные операторные слагаемые $R - \mu E$ в (34) имеют (смотри (3), (16)) диагональное преобладание как по строкам, так и по столбцам.

Аналогично (27), (28) для приближенного решения задачи (32), (33) будем использовать двухслойную разностную схему с весами:

$$\frac{s^{n+1} - s^n}{\tau} + \tilde{A}(\sigma s^{n+1} + (1 - \sigma)s^n) = \tilde{\varphi}^n, \quad (35)$$

$$s^0 = u^0. \quad (36)$$

где

$$\tilde{A} = \tilde{A}(\sigma t^{n+1} + (1 - \sigma)t^n), \quad \tilde{\varphi}^n = \exp(\mu\sigma\tau) \exp(\mu t^n)\varphi(\sigma t^{n+1} + (1 - \sigma)t^n).$$

Условия устойчивости схемы (35), (36) проверяются аналогично условиям устойчивости схемы (27), (28). Оценка устойчивости по начальным данным и правой части имеет вид

$$\|s^{n+1}\| \leq \|u^0\| + \sum_{k=0}^n \tau \|\tilde{\varphi}^k\|. \quad (37)$$

При построении разностной схемы с весами для (17), (18), (3) воспользуемся соотношениями

$$s^{n+1} = \exp(\mu t^{n+1})y^{n+1}, \quad s^n = \exp(\mu t^n)y^n.$$

Подстановка в (35), (36) дает разностную схему

$$\frac{\exp(\mu\tau)y^{n+1} - y^n}{\tau} + \tilde{A}(\sigma \exp(\mu\tau)y^{n+1} + (1 - \sigma)y^n) = \exp(\mu\sigma\tau)\varphi^n, \quad (38)$$

$$y^0 = u^0. \quad (39)$$

Из (37) следует оценка

$$\|y^{n+1}\| \leq \exp(-\mu t^{n+1}) \|u^0\| + \sum_{k=0}^n \tau \exp(\mu \sigma \tau) \exp(-\mu(t^{n+1} - t^k)) \|\varphi^k\|. \quad (40)$$

Итогом нашего рассмотрения является следующее утверждение.

Теорема. Разностная схема (38), (39), в которой (12)–(14), (16) является устойчивой и для разностного решения верна априорная оценка (40) в L_∞ для всех $\tau > 0$, если $\sigma = 1$ и при ограничениях на шаг по времени

$$\tau \leq \frac{1}{(1 - \sigma)\gamma}$$

где

$$\gamma = \max_{x \in \omega} \left(\frac{1}{h^2} (k(x+0.5h) + k(x-0.5h)) - \frac{1}{2h} (v(x+0.5h, t) - v(x-0.5h, t)) + r(x, t) - \mu \right),$$

если $0 \leq \sigma < 1$.

Аналогично выводится устойчивая схема для задачи (2)-(5).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Samarskii A.A. The theory of difference schemes. Marcel Dekker Inc., New York, 2001.
- [2] Samarskii A.A., Gulin, A.V. Stability of Difference Schemes. Nauka, Moscow, 1973, (in Russian).
- [3] Samarskii A.A., Matus, P.P. and Vabishchevich, P.N. Difference Schemes with Operator Factors. Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [4] Ascher U.M., Ruuth S. J., Wetton B.T.R. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. SIAM Journal on Numerical Analysis, Volume 32 (1995), no. 3, pp. 797–823.
- [5] Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. Numerical Methods for Solving Convection-diffusion. URSS, Moscow, 1999 (in Russian).
- [6] Ruuth S. J. Implicit-explicit methods for reaction-diffusion problems in pattern formation. Journal of Mathematical Biology, Volume 34(1995), no. 2, pp. 148–176.

- [7] Vabishchevich P.N., Vasil'eva M.V. Explicit-implicit schemes for convection–diffusion–reaction problems. *Siberian J. Num. Math.*, 15 (2012), no.4, p.p.359–369.
- [8] Mickens R.E. Nonstandard Finite Difference Schemes for Differential Equations. *Journal of Difference Equations and Applications*, 8(2002), no.9, pp. 823-847.
- [9] Mickens R.E., ed., *Advances in the applications of nonstandard finite difference schemes*, World Scientific, New Jersey, 2005.
- [10] Afanas'eva N.M., Vabishchevich P.N., Vasil'eva M.V. Unconditionally stable schemes for convection-diffusion problems, *Russian Mathematics*, 2013, 57:3, pp.1-11.
- [11] Afanas'eva N.M., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. Unconditionally monotone schemes for unsteady convection-diffusion problems. *Computational Methods in Applied Mathematics*. Volume 13, Issue 2, pp. 185–205.
- [12] Horn R.A., Johnson C.R. *Matrix analysis*. Cambridge Univ Pr, 1990.
- [13] Dekker K., Verwer J.G. *Stability of Runge-Kutta Methods for Stiff Nonlinear Differential Equations*. North-Holland, Amsterdam, 1984.
- [14] Hairer E., Norsett S.P., Wanner G. *Solving Ordinary Differential Equations. I. Nonstiff Problems*. Springer-Verlag, Berlin, 1987.
- [15] Desoer C., Haneda H. The measure of a matrix as a tool to analyze computer algorithms for circuit analysis. *IEEE Trans. Circuit Theory*, 19 (1972), pp. 480–486.

Вычислительные технологии: подготовка специалистов

Вабищевич П.Н.¹, Васильев В.И.²

¹*ИБРАЭ РАН, Москва, Россия;*

vabishchevich@gmail.com

²*СВФУ им.М.К. Аммосова, Якутск, Россия;*

vasvasil@mail.ru

Аннотация

Перед высшей школой стоит первостепенная задача подготовки и переподготовки специалистов, прежде всего, инженерного-технического и естественно-научного профиля, которые владеют современными вычислительными технологиями. В СВФУ им. М.К. Аммосова (Центр вычислительных технологий, Институт математики и информатики) разработана программа подготовки магистрантов по направлению *Вычислительные технологии*.

Ключевые слова: математическое моделирование, численные методы, вычислительные технологии, подготовка специалистов.

Благодарности: работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 13-01-00719).

Введение

Современные научные и инженерные вычисления проводятся на основе численного исследования прикладных математических моделей. Математические модели включают в себя линейные и нелинейные уравнения, системы обыкновенных дифференциальных моделей. Но ядром прикладных моделей являются системы уравнений в частных производных, причем уравнения являются нестационарными и нелинейными, уравнения системы сильно связаны друг с другом. Они дополняются соответствующими граничными и начальными условиями. Для получения точного количественного практически значимого результата необходимо численно решать краевые задачи в сложных расчетных областях.

Существующие учебные планы подготовки специалистов высшей квалификации в области научных и инженерных вычислений плохо отражают реалии сегодняшнего дня. Они ориентируют на проведение научных и инженерных вычислений с позиций специалистов по численным методам, по вычислительной математике. Такой подход предусматривает самостоятельную разработку численного метода, самостоятельное программирование и самостоятельно проведенные вычисления и их обработку. Такая исключительно авторская методология уместна при решении достаточно простых задач и предполагает редко достигаемую универсальность исследователя.

Прикладное программное обеспечение должно отражать достигнутый уровень исследований по вычислительным методам и технологиям программирования, возможности вычислительной техники. Такая актуализация разрабатываемого программного продукта может достигаться в рамках компонентного программирования. В качестве компонент выступают программные единицы, которые обеспечивают решение вычислительных задач, задач визуализации и обработки на современном уровне. Отмеченные специализированные компоненты ориентированы на численное решение типовых задач вычислительной математики и разрабатываются специалистами по вычислительным методам и программированию. Именно последнее обстоятельство и обеспечивает качество программного продукта при работе на современной вычислительной технике.

Программное обеспечение научных и инженерных исследований в значительной степени базируется на сторонних разработках. На основе модульного анализа прикладной математической модели выделяются базовые вычислительные задачи, организуется алгоритмический интерфейс между ними. Вычислительная реализация выделенных отдельных подзадач проводится с использованием стандартизованных вычислительных компонент. Компонентный подход может использоваться также при подготовке расчетной задачи (препроцессинге), при обработке и визуализации расчетных данных (постпроцессинг).

Разработка прикладного программного обеспечения проводится на основе определенных стандартов и соглашений. Это касается, в частности, языка программирования. Достаточно долго программирование при проведении научных и инженерных вычислений проводилось с использованием алгоритмического языка Fortran. Его основное преимущество состоит в наличии большого количества написанных на нём программ и библиотек подпрограмм, которые, чаще всего, доступны в исходных кодах и хорошо документированы. В настоящее время ситуация меняется в пользу других языков программирования, прежде всего C и C++. Новые вычислительные библиотеки, отдельные компоненты пишутся обычно на C/C++, имеющееся хорошо зарекомендовавшееся прикладное программное обеспечение переписывается с языка Fortran.

В исследовательских работах мы традиционно ориентируемся на использование свободного программного обеспечения (СПО). Особенно уместно использование СПО в учебном процессе. Второе требование касается кроссплатформенности, когда программное обеспечение должно работать более чем на одной аппаратной платформе и/или операционной системе. Кроссплатформенными должны быть используемые языки программирования (компиляторы для языка под различные платформы), библиотеки (компоненты) и прикладное программное обеспечение.

Еще один важный момент связан с многопроцессорностью вычислительной техники. Разработка прикладного программного продукта для многопроцессорных систем с общей памятью (многоядерные компьютеры) базируется на использовании OpenMP. Для систем с распределенной памятью (кластеры) де-юре стандартом программирования стал MPI. Основные особенности прикладных задач, которые

описываются уравнениями с частными производными и решаются на параллельных компьютерах, учитываются библиотекой PETSc.

Приведенные соображения определили структуру учебного плана магистратуры по направлению *Вычислительные технологии*, направленного на подготовку специалистов по приближенному решению прикладных проблем на параллельных вычислительных системах.

Учебный план

Базовая часть общенаучного цикла включает курсы:

- Современные вычислительные технологии;
- Численные методы линейной алгебры;
- Метод конечных элементов.

Вариативная часть представлена обязательными дисциплинами:

- Численные методы решения нестационарных задач;
- Параллельные системы научных вычислений;
- Компьютерные системы подготовки научных публикаций.

Дисциплины по выбору:

- Численные методы решения обратных задач;
- Численные методы оптимизации.

Базовая часть профессионального цикла состоит из курсов:

- Математические модели в естествознании;
- Геометрические модели и расчетные сетки;
- Программное обеспечение решения систем линейных и нелинейных уравнений.

Обязательные дисциплины вариативной части представлены курсами:

- Практика научных вычислений;
- Студенческий научно-исследовательский семинар.

С учетом тематики проводимых научных исследований в СВФУ предлагаются следующие дисциплины по выбору:

- Математическое моделирование процессов тепло- и массопереноса;
- Математическое моделирование фильтрации.

Современные вычислительные технологии отрабатываются на основе использования метода конечных элементов и свободного программного обеспечения научных исследований.

Аннотации дисциплин (модулей)

Современные вычислительные технологии

Рассматриваются основы новой методологии научных исследований - математического моделирования и вычислительного эксперимента. Сущность этой методологии состоит в замене исходного объекта его математической моделью и исследовании современными вычислительными средствами математических моделей. При использовании вычислительных средств (компьютеров и численных методов) исследуются сложные нелинейные математические модели. Вычислительные средства становятся основными, абсолютно преобладающими. Традиционные средства прикладного математического моделирования выполняют вспомогательную, обслуживающую роль: качественное исследование задачи в сильно упрощенных постановках — модельные задачи, тестирование вычислительных алгоритмов и т. д.

Именно возможность исследования сложных математических моделей на основе численных методов и компьютеров позволяет с новых позиций рассмотреть методологию научных исследований. Мощные компьютеры, высокоэффективные вычислительные алгоритмы, современное программное обеспечение позволяют в настоящее время организовать научные исследования в рамках единой технологии вычислительного эксперимента, который включает в себя теоретические и экспериментальные исследования.

Численные методы линейной алгебры

Построение вычислительного алгоритма для компьютеров связано с переходом к дискретной модели, которая представляет собой систему уравнений. Решение нелинейных уравнений проводится на основе использования различных процедур линеаризации, когда на каждом итерационном шаге требуется решить линейную задачу. Рассматриваются наиболее широко представленные в вычислительной практике численные методы решения систем линейных алгебраических уравнений.

Обсуждаются возможности прямых методов при ориентации на разреженные системы уравнений, к которым мы приходим при дискретизации краевых задач для уравнений с частными производными. Основное внимание уделяется итерационным методам приближенного решения систем линейных уравнений. Обсуждаются проекционные методы и методы подпространств Крылова. Затрагиваются также вопросы численного решения систем уравнений на компьютерах параллельной архитектуры.

Метод конечных элементов

В настоящее время основным методом приближенного решения краевых задач для уравнений с частными производными является метод конечных элементов. Расчетная область разбивается на конечное число подобластей (элементов) с аппроксимацией решения на каждом таком элементе. Дискретная задача строится на основе вариационной формулировки краевой задачи.

Основное внимание в курсе уделяется алгоритмическим аспектам метода конечных элементов. Изучение начинается с вариационной формулировки линейных краевых задач для эллиптического уравнения второго порядка. Отмечаются основные подходы к триангуляции расчетной области. Подробно обсуждаются конечные элементы на основе полиномиальной аппроксимации. Рассмотрены вопросы построения системы линейных уравнений и алгоритмы ее решения.

Численные методы решения нестационарных задач

Современное математическое моделирование базируется на численном решении краевых задач для систем нестационарных уравнений с частными производными. В качестве базовых нестационарных задач рассматриваются параболические и гиперболические уравнения второго порядка. Отработка вычислительных алгоритмов, их теоретический анализ проводится для линейных краевых задач. Для аппроксимации по пространству наиболее широко используются разностные методы, метод конечных элементов и метод конечных объемов. Полученная система обыкновенных дифференциальных уравнений имеет две основные особенности: большое число неизвестных и жесткость системы (разномасштабность временных процессов). Систему обыкновенных дифференциальных уравнений удобно записывать в виде дифференциально-операторного уравнения, когда основные свойства задачи передаются свойствами операторов в выбранных пространствах.

Исследуются общие условия устойчивости двух- и трехслойных операторно-разностных схем, рассматриваются схемы высокого порядка точности. С использованием представления оператора задачи в виде суммы операторов строятся схемы расщепления, когда переход на новый временной слой реализуется на основе решения более простых задач для отдельных операторных слагаемых.

Параллельные системы научных вычислений

Инженерные и научные вычисления проводятся на параллельных вычислительных системах, которые обеспечивают параллельную обработку данных на многих вычислительных узлах. При разработке современного прикладного программного обеспечения необходимо учитывать эти особенности компьютеров для максимального использования их возможностей.

Параллельные вычисления поддерживаются различными технологиями программирования. Повышение быстродействия программы на вычислительных си-

стемах, которые имеют несколько процессоров, процессор с несколькими ядрами, а также на кластере машин обеспечивается использованием многопоточной модели программирования. Разработка прикладного программного продукта для многопроцессорных систем с общей памятью (многоядерные компьютеры) базируется на использовании OpenMP. Для систем с распределенной памятью (кластеры) де-юре стандартом программирования стал MPI. Для визуализации и анализа больших расчетных данных в инженерных и научных вычислениях используется ParaView, который может работать с разделяемой и распределенной памятью на однопроцессорных и параллельных вычислительных системах.

Для инженерных и научных вычислений широко используется библиотека PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation). Этот программный инструментариий поддерживает современные парадигмы параллельного программирования на основе стандарта MPI. Основное внимание уделяется численному решению линейных и нелинейных систем уравнений, которые возникают при приближенном решении краевых задач для уравнений с частными производными. Общий программный инструментариий мультифизического моделирования включает средства подготовки геометрических и сеточных моделей, построения дискретной задачи (аппроксимация), численного решения полученных систем дифференциальных и алгебраических уравнений с поддержкой возможности визуализации и обработки расчетных данных. Примером является пакет FEniCS, который базируется на использовании метода конечных элементов. Обсуждаются основные возможности применения этого программного инструментариия при решении краевых задач для уравнений с частными производными.

Компьютерные системы подготовки научных публикаций

Структура научной публикации: статья, отчет, магистерская диссертация. Форматирование страницы, текстового абзаца, включение таблиц и графиков. Подготовка статьи, магистерской диссертации в издательской системе LaTeX. Особенности набора математических формул. Использование текстового процессора Libre Office (Open Office), набор математических текстов.

Работа с библиографией, стандарты библиографических записей. Библиографическая база данных, bibtex. Программа Zotero, поиск библиографических данных в интернете. Использование Zotero при подготовке публикации в LaTeX, в текстовом процессоре.

Численные методы решения обратных задач

В традиционных курсах по методам решения задач математической физики рассматриваются прямые задачи. При этом решение определяется из уравнений с частными производными, которое дополняется определенными краевыми и начальными условиями. В обратных задачах некоторые эти составляющие постановки за-

дачи отсутствуют. Неизвестными могут быть, например, начальные условия, граничные режимы, коэффициенты и правые части уравнений. Обратные задачи часто являются некорректными в классическом смысле и для их приближенного решения приходится применять методы регуляризации.

Рассматриваются некоторые обратные задачи для стационарных и нестационарных уравнений математической физики: идентификация правой части, граничных и начальных условий, а также коэффициентов уравнения. Дается достаточное полное и замкнутое исследование основных проблем, которые возникают при приближенном решении обратных задач: постановка задачи, алгоритм решения, программная реализация и результаты расчетов. Используется минимальный математический аппарат, связанный с базовыми свойствами операторов в конечномерных пространствах.

Численные методы оптимизации

Постановка и классификация задач оптимизации. Условия существования глобального решения. Линейное программирование, симплекс-метод. Нелинейное программирование. Элементы выпуклого анализа. Условия первого порядка оптимальности в задаче оптимизации на выпуклом множестве. Условия первого и второго порядков оптимальности в задаче безусловной оптимизации, в задаче с ограничениями (принцип Лагранжа). Методы штрафа.

Задачи управления системами, которые описываются уравнениями с частными производными. Квадратичные функционалы качества управления, условия оптимальности. Градиентные методы решения задач управления, основное и сопряженное состояние. Задачи управления для эллиптического уравнения второго порядка, управление нестационарными процессами (параболическое уравнение второго порядка).

Математические модели в естествознании

Теоретические и экспериментальные исследования, фундаментальные математические модели (теоретический базис). Прикладные математические модели, краевые и начальные условия. Построение математических моделей. Базовые вычислительные задачи, системы линейных алгебраических уравнений, нелинейные уравнения. Задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Базовые стационарные и нестационарные математические модели. Краевые задачи для эллиптических уравнений второго порядка, задачи для параболических уравнений второго порядка.

Типовые математические модели естествознания. Описание процессов теплопередачи. Электричество и магнетизм, потенциалы электромагнитного поля, электро- и магнитостатика, протекание тока в проводниках, электромагнитные колебания. Механика сплошной среды, сжимаемые и несжимаемые течения, задачи

акустики, идеальная жидкость, задачи фильтрации. Механика твердого тела, система уравнений упругости, балки, мембраны, оболочки. Задачи сопряжения — мультифизические проблемы, тепловые и электрические явления, термоупругость, проблемы тепло- и массопереноса, магнитная гидродинамика.

Геометрические модели и расчетные сетки

Подготовка геометрической модели с использованием CAD (Computer-Aided Design) системах. Твёрдотельное моделирование, CSG (Constructive Solid Geometry) формат. Параметрические геометрические модели. Практическая работа в системе геометрического моделирования FreeCAD.

Задача построения расчетной сетки. Структурированные сетки, алгоритмы генерации сеток. Общие неструктурированные сетки, треугольные (тетраэдральные) сетки. Триангуляции Делоне и разбиение Вороного. Адаптивные сетки. Генерация сеток с использованием программ Netgen и Gmsh.

Программное обеспечение решения систем линейных и нелинейных уравнений

Программное обеспечение научных и инженерных исследований в значительной степени базируется на сторонних разработках. На основе модульного анализа прикладной математической модели выделяются базовые вычислительные задачи, организуется алгоритмический интерфейс между ними. Вычислительная реализация выделенных отдельных подзадач проводится с использованием стандартизованных вычислительных компонент. Эти компоненты должны поддерживать вычисления на параллельных вычислительных системах.

После аппроксимации по времени и по пространству прикладная математическая модель сводится к системе нелинейных алгебраических уравнения. Для ее приближенного решения используются метод Ньютона и его модификации. Вычислительные алгоритмы базируются на численном решении разреженных систем линейных уравнений. Рассматриваются прямые и итерационные методы и соответствующее свободное программное обеспечение. Основное внимание уделяется возможностям пакетов Trilinos и PETSc, которые предназначены для численного решения линейных и нелинейных систем уравнений, которые возникают при приближенном решении краевых задач для уравнений с частными производными.

Практика научных вычислений

Программный инструментальный прикладного моделирования включает средства подготовки геометрических и сеточных моделей, построения дискретной задачи (аппроксимация), численного решения полученных систем дифференциальных и алгебраических уравнений с поддержкой возможности визуализации и обработки расчетных данных.

Современные вычислительные технологии отрабатываются на основе использования пакета FEniCS, в котором краевые задачи решаются методом конечных элементов. Обсуждаются основные возможности применения этого программного инструментария при решении стационарных и нестационарных задач для уравнений с частными производными. Для построения расчетных сеток привлекаются программы Netgen и Gmsh. Для решения систем линейных уравнений используются возможности пакета PETSC с обеспечением поддержки параллельных вычислений.

Студенческий научно-исследовательский семинар

Работа под руководством научного руководителя в рамках постоянно действующего студенческого научного семинара. Реферативная и методическая работа по теме магистерской диссертации.

В рамках одного семинара работает группа студентов и их научных руководителей по близкой тематике магистерских работ.

Математическое моделирование процессов тепло- и массопереноса

Перенос тепла от одних участков твердого тела к другим осуществляется теплопроводностью (перенос, определяемый взаимодействием микрочастиц соприкасающихся тел), конвекцией (перенос, обусловленный пространственным перемещением вещества, наблюдается в движущихся средах — жидкости, газы) и излучением (перенос энергии в виде электромагнитных волн). Во многих прикладных проблемах процесс переноса тепла осуществляется различными способами (сложный теплообмен). При описании конвективных переносов необходимо учитывать процессы теплопроводности между отдельными частями сплошной среды (тепло- и массоперенос). Радиационный теплообмен (излучение) может осложняться теплопроводностью, конвекцией и т.д. Примером такого сложного теплообмена могут служить процессы при фазовых превращениях, химических реакциях. При рассмотрении процессов теплопередачи в твердых телах большое значение могут приобретать эффекты, связанные с расширением тел при повышении температуры.

Излагаются основы численных методов решения задач теплопередачи на примере стационарных и нестационарных двумерных задач теплопроводности. Основное внимание уделяется дискретным задач для эллиптических уравнений второго порядка с соответствующими краевыми условиями. Описываются конечно-разностные и конечно-элементные аппроксимации, основные итерационные методы решения сеточных эллиптических задач. Строятся и анализируются аппроксимации по времени при решении краевых задач для параболических уравнений второго порядка. Отмечаются особенности решения задач с фазовыми переходами.

Математическое моделирование фильтрации

Дифференциальные уравнения динамики жидкости в той или иной мере выражают, прежде всего, законы сохранения массы и количества движения. Система уравнений включает в себя уравнения неразрывности, выражающие закон сохранения массы каждой отдельной фазы. Уравнения движения записываются в виде закона Дарси, который связывает скорость с давлением. В простейшем виде без учета капиллярных эффектов давление считается общим для всех фаз. Замыкание системы уравнений проводится на основе постоянства суммы всех насыщенных. Математические модели процессов массопереноса в пористых являются существенно нелинейными и трудными для исследования. Обычный подход, который используется при численном решении задач многокомпонентной фильтрации, состоит в получении уравнения для давления — эллиптического для несжимаемых сред и параболического для сжимаемых.

Базовыми задачами для задач фильтрации являются стационарные и нестационарные задачи конвекции-диффузии-реакции. Отмечаются основные особенности таких задач, которые связаны с несамоспряженностью задачи. Выделены основные свойства операторов диффузионного и конвективного переноса, которые сохраняются при построении дискретных аналогов. Строятся безусловно устойчивые аппроксимации по времени. Для задач фильтрации многофазной жидкости традиционно широко используется IMPES (Implicit Pressure Explicit Saturation) метод. Он основан на использовании неявных схем по времени для расчета давления (эллиптическая сеточная задача) и явных схем для расчета насыщенных (гиперболическая система уравнений).

Численное моделирование фильтрации на основе модели двойной пористости

Вабищевич П.Н.¹, Григорьев А.В.²

¹Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Москва,
Россия;

vabishchevich@gmail.com

²Центр вычислительных технологий Северо-Восточного федерального
университета, Якутск, Россия;

re5itsme@gmail.com

Аннотация

Рассматриваются модели двойной пористости, которые представляют из себя систему двух связанных уравнений параболического типа. Основным вариантом данного класса моделей является модель Баренблатта, в которой связь между уравнениями осуществляется через обменный переток между средами. Также обсуждаются более общие модели двойной пористости, в которых уравнения связаны не только по младшим коэффициентам, но и по старшим, а также по коэффициентам при производных по времени. Отдельное внимание при изучении данных моделей уделяется построению схем расщепления, когда переход на новый временной слой осуществляется на основе решения двух стандартных краевых задач для параболических уравнений второго порядка.

Ключевые слова: модель двойной пористости, фильтрация, схемы расщепления.

Постановка задачи

Рассматривается модель двойной пористости задачи однофазной фильтрации флюида в трещиновато-пористой среде. Для несжимаемых сред основная система уравнений имеет вид:

$$c_1(\mathbf{x}) \frac{\partial u_1}{\partial t} - \operatorname{div}(d_1(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_1) + r(\mathbf{x})(u_1 - u_2) = f_1(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

$$c_2(\mathbf{x}) \frac{\partial u_2}{\partial t} - \operatorname{div}(d_2(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_2) + r(\mathbf{x})(u_2 - u_1) = f_2(\mathbf{x}, t). \quad (2)$$

Здесь индексами 1 и 2 обозначены соответственно параметры трещиноватой и пористой сред, коэффициент $r(\mathbf{x})(u_1 - u_2)$ описывает обменный поток между средами, $d_i = k_i/\mu$, k_i — проницаемости, μ — вязкость флюида. Задача рассматривается в ограниченной области Ω при $0 < t \leq T$.

В более общем виде модель двойной пористости можно записать следующим образом:

$$c_{11}(\mathbf{x}) \frac{\partial u_1}{\partial t} + c_{12}(\mathbf{x}) \frac{\partial u_2}{\partial t} - \operatorname{div}(d_{11}(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_1) - \operatorname{div}(d_{12}(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_2) + r(\mathbf{x})(u_1 - u_2) = f_1(\mathbf{x}, t), \quad (3)$$

$$c_{21}(\mathbf{x}) \frac{\partial u_1}{\partial t} + c_{22}(\mathbf{x}) \frac{\partial u_2}{\partial t} - \operatorname{div}(d_{21}(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_1) - \operatorname{div}(d_{22}(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_2) + r(\mathbf{x})(u_2 - u_1) = f_2(\mathbf{x}, t). \quad (4)$$

Здесь уравнения (3), (4) завязаны не только обменным потоком, но также уравнения завязаны через коэффициенты при производных по времени и коэффициенты диффузии.

Как и ранее, модель основанную на системе уравнений (1), (2) будем называть моделью Баренблатта, а при использовании системы уравнений (3), (4) будем говорить об обобщенной модели двойной пористости.

Из физических соображений для коэффициента обменного потока имеем

$$r(\mathbf{x}) \geq 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega.$$

Для коэффициентов при производных по времени предполагаем, что

$$c_{12}(\mathbf{x}) = c_{21}(\mathbf{x}),$$

$$\sum_{\alpha, \beta=1}^2 c_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \zeta_\alpha \zeta_\beta \geq \delta_c \sum_{\alpha=1}^2 \zeta_\alpha^2, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad \delta_c = \operatorname{const} > 0.$$

Аналогичные предположения используются для коэффициентов диффузии:

$$d_{12}(\mathbf{x}) = d_{21}(\mathbf{x}),$$

$$\sum_{\alpha, \beta=1}^2 d_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \zeta_\alpha \zeta_\beta \geq \delta_d \sum_{\alpha=1}^2 \zeta_\alpha^2, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad \delta_d = \operatorname{const} > 0.$$

Система уравнений (1) — (2) дополняется начальными условиями:

$$u_1(\mathbf{x}, 0) = u_1^0(\mathbf{x}), \quad (5)$$

$$u_2(\mathbf{x}, 0) = u_2^0(\mathbf{x}). \quad (6)$$

В качестве граничных условий рассматриваются граничные условия первого, второго или третьего рода. Для определенности, сформулируем граничные условия первого рода:

$$u_1(\mathbf{x}, t) = g_1(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad (7)$$

$$u_2(\mathbf{x}, t) = g_2(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega. \quad (8)$$

Для исследования данной модели ограничимся двумерным случаем, который достаточно качественно и наглядно передает особенности исследуемой модели.

Модельная задача

Перепишем безразмерную систему уравнений модели двойной пористости (1), (2) в виде:

$$c \frac{\partial u_1}{\partial t} - \operatorname{div} \operatorname{grad} u_1 + r(u_1 - u_2) = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} - d \operatorname{div} \operatorname{grad} u_2 + r(u_2 - u_1) = 0. \quad (10)$$

Для вычислительного эксперимента рассмотрим случай постоянных коэффициентов при однородных правых частях:

$$f_\alpha(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, T], \quad \alpha = 1, 2.$$

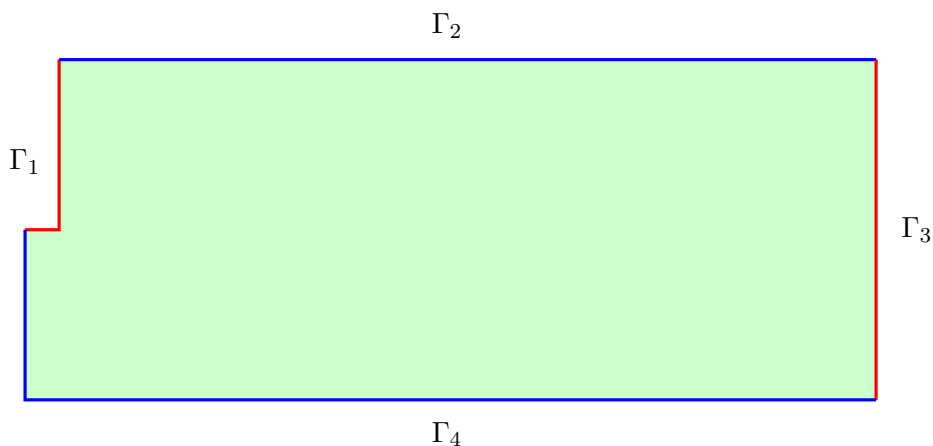


Рис. 1: Область Ω

Рассмотрим двумерную задачу в области Ω , которая отображена на рис. 1. В данном случае ($\Gamma_D = \Gamma_1 \cup \Gamma_3$, $\Gamma_N = \Gamma_2 \cup \Gamma_4$) граничные условия берутся в виде:

$$u_\alpha(\mathbf{x}, t) = 1 - \exp(-\delta t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_1, \quad u_\alpha(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_3, \quad (11)$$

$$d_\alpha(\mathbf{x}) \frac{\partial u_\alpha}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_2 \cup \Gamma_4, \quad t \in (0, T]. \quad (12)$$

Начальное состояние определяется условиями

$$u_\alpha(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad \alpha = 1, 2. \quad (13)$$

Из постановки задачи следует, что на части границы Γ_1 повышается давление от 0 до 1. Динамика подъема давления зависит от параметра δ . Физически это, например, может означать наличие на части границы Γ_1 нагнетающей скважины.

Вычислительный алгоритм

Для приближенного решения нестационарной задачи фильтрации введем равномерную, для простоты, сетку по времени с шагом τ :

$$\bar{\omega}_\tau = \omega_\tau \cup \{T\} = \{t^n = n\tau, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad \tau N = T\},$$

и обозначим $y^n = y(t^n)$, $t^n = n\tau$. По пространству используем конечно-элементную аппроксимацию, состоящую из стандартных лагранжевых конечных элементов второй степени. В области Ω проводится триангуляция, на этой расчетной сетке определим конечномерное пространство конечных элементов $V \subset H^2(\Omega)$. Используемая расчетная сетка сгущена к участкам с наибольшими градиентами решения. Будем рассматривать полностью неявную схему по времени.

$$c \frac{y_1^{k+1} - y_1^k}{\tau} - \operatorname{div} \operatorname{grad} y_1^{k+1} + r(y_1^{k+1} - y_2^{k+1}) = 0, \quad (14)$$

$$\frac{y_2^{k+1} - y_2^k}{\tau} - d \operatorname{div} \operatorname{grad} y_2^{k+1} + r(y_2^{k+1} - y_1^{k+1}) = 0. \quad (15)$$

Далее необходимо представить задачу в вариационном виде. Домножим каждое уравнение на соответствующую триальную функцию и проинтегрируем по области Ω — при интегрировании применим формулу интегрирования по частям. Тем самым мы получим вариационную формулировку поставленной задачи:

$$c \int_\Omega \frac{y_1^{k+1} - y_1^k}{\tau} v_1 d\mathbf{x} + \int_\Omega \operatorname{grad} y_1^{k+1} \operatorname{grad} v_1 d\mathbf{x} + r \int_\Omega (y_1^{k+1} - y_2^{k+1}) v_1 d\mathbf{x} = 0, \quad (16)$$

$$\int_{\Omega} \frac{y_2^{k+1} - y_2^k}{\tau} v_2 dx + d \int_{\Omega} \text{grad } y_2^{k+1} \text{ grad } v_2 dx + r \int_{\Omega} (y_2^{k+1} - y_1^{k+1}) v_2 dx = 0. \quad (17)$$

Из (16), (17) видно, что наша задача является завязанной и раздельным образом ее решить нельзя. Поэтому, применяя метод конечных элементов, мы вынуждены будем построить большую совместную матрицу.

Результаты расчетов

Приведем результаты численных расчетов, которые выполнены на достаточно подробных сетках. Контроль приближенного решения (зависимость от параметров задачи) будем проводить путем сравнения с эталонным решением (решением на достаточно мелкой сетке).

Рассмотрим одну из вычислительных сеток рис. 2.

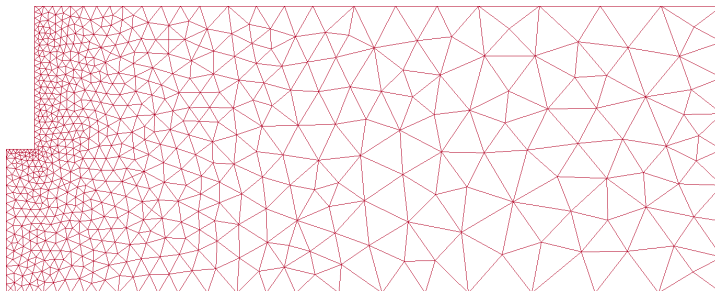


Рис. 2: Расчетная сетка 3: 700 узлов, 1294 треугольника

Моделирование проводилось при параметрах $c = 0.01$, $d = 0.01$, $r = 2.0$.

Распределения давлений в трещинах и порах отображены на рис. 3 — 8. Исходя из полученных результатов расчетов, можно сделать следующие выводы:

- Наблюдается сходимость численного решения к эталонному как по пространству, так и по времени;
- При максимально детальных разбиениях по пространству и времени более точной является схема, которая соответствует случаю $\gamma = 0$;
- Решения u_1 и u_2 со временем выходят на стационарное решение;
- Давление в трещинах (u_1) быстрее устанавливается нежели давление в порах (u_2).

Рис. 3: Распределение давления в трещинах при $t = 1$ Рис. 4: Распределение давления в порах при $t = 1$

Схемы расщепления

При трехмерной геометрии задачи, при расчетах на мелких сетках решение системы (16), (17) требует больших вычислительных затрат. Поэтому появляется необходимость построения схем, позволяющих независимо решать уравнения системы. Модифицируем полностью неявную схему (14), (15) для поставленной задачи. Данная схема расщепления позволяет считать каждое уравнение отдельно, не создавая большую совместную матрицу:

$$c \frac{y_1^{k+1} - y_1^k}{\tau} - \operatorname{div} \operatorname{grad} y_1^{k+1} + r(y_1^{k+1} - y_2^k) = 0, \quad (18)$$

$$\frac{y_2^{k+1} - y_2^k}{\tau} - d \operatorname{div} \operatorname{grad} y_2^{k+1} + r(y_2^{k+1} - y_1^{k+1}) = 0. \quad (19)$$

Аналогичным образом модифицируем вариационную постановку (16), (17) с целью *развязать* систему:

$$c \int_{\Omega} \frac{y_1^{k+1} - y_1^k}{\tau} v_1 dx + \int_{\Omega} \operatorname{grad} y_1^{k+1} \operatorname{grad} v_1 dx + r \int_{\Omega} (y_1^{k+1} - y_2^k) v_1 dx = 0, \quad (20)$$

Рис. 5: Распределение давления в трещинах при $t = 2$ Рис. 6: Распределение давления в порах при $t = 2$

$$\int_{\Omega} \frac{y_2^{k+1} - y_2^k}{\tau} v_2 dx + d \int_{\Omega} \text{grad } y_2^{k+1} \text{ grad } v_2 dx + r \int_{\Omega} (y_2^{k+1} - y_1^{k+1}) v_2 dx = 0. \quad (21)$$

Изменениям подверглось первое уравнение (20), в котором вместо y_2^{k+1} мы используем y_2^k . Таким образом, уравнение (20) вычисляется независимо от уравнения (21). Используем уже известные значения y_1^{k+1} для решения уравнения 21. Тем самым, мы показали что уравнения (20), (21) при вычислениях не зависят друг от друга (*развязаны*).

Предложенная последовательная схема расщепления относится к классу безусловно устойчивых. Исследование устойчивости подобных схем расщепления для систем уравнений проводится на основе теории устойчивости (корректности) операторно-разностных схем А.А. Самарского [2, 3, 4]. Некоторые принципиальные результаты в этом направлении представлены в отдельной части нашей работы.

Недостатком полученной схемы является ее последовательная реализация. То есть уравнения (20), (21) вычисляются строго друг за другом. Рассмотрим следующую

Рис. 7: Распределение давления в трещинах при $t = 4$ Рис. 8: Распределение давления в порах при $t = 4$

щю схему расщепления, которая не обладает данным недостатком:

$$c \frac{y_1^{k+1} - y_1^k}{\tau} - \operatorname{div} \operatorname{grad} y_1^{k+1} + r(y_1^{k+1} - y_2^k) = 0, \quad (22)$$

$$\frac{y_2^{k+1} - y_2^k}{\tau} - d \operatorname{div} \operatorname{grad} y_2^{k+1} + r(y_2^{k+1} - y_1^k) = 0. \quad (23)$$

Соответствующая модификация вариационной постановки (16), (17):

$$c \int_{\Omega} \frac{y_1^{k+1} - y_1^k}{\tau} v_1 dx + \int_{\Omega} \operatorname{grad} y_1^{k+1} \operatorname{grad} v_1 dx + r \int_{\Omega} (y_1^{k+1} - y_2^k) v_1 dx = 0, \quad (24)$$

$$\int_{\Omega} \frac{y_2^{k+1} - y_2^k}{\tau} v_2 dx + d \int_{\Omega} \operatorname{grad} y_2^{k+1} \operatorname{grad} v_2 dx + r \int_{\Omega} (y_2^{k+1} - y_1^k) v_2 dx = 0. \quad (25)$$

Основным отличием данной схемы от (20), (21) является ее параллельная реализация. При ее использовании уравнения (24), (25) можно решать одновременно и независимо друг от друга.

Аналогичные схемы расщепления можно применять и в более общих моделях двойной пористости. В этом случае давления в трещинах и порах определяются как решение соответствующей краевой задачи для системы уравнений

$$\begin{aligned} c_{11}(\mathbf{x}) \frac{\partial u_1}{\partial t} + c_{12}(\mathbf{x}) \frac{\partial u_2}{\partial t} - \operatorname{div} (d_{11}(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_1) - \operatorname{div} (d_{12}(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_2) \\ + r(\mathbf{x})(u_1 - u_2) = f_1(\mathbf{x}, t), \\ c_{21}(\mathbf{x}) \frac{\partial u_1}{\partial t} + c_{22}(\mathbf{x}) \frac{\partial u_2}{\partial t} - \operatorname{div} (d_{21}(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_1) - \operatorname{div} (d_{22}(\mathbf{x}) \operatorname{grad} u_2) \\ + r(\mathbf{x})(u_2 - u_1) = f_2(\mathbf{x}, t). \end{aligned}$$

Для коэффициентов $c_{\alpha\beta}$ при производных по времени (а также и для $d_{\alpha\beta}$) мы имеем:

$$\begin{aligned} c_{12}(\mathbf{x}) = c_{21}(\mathbf{x}), \\ \sum_{\alpha, \beta=1}^2 c_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \zeta_\alpha \zeta_\beta \geq \delta_c \sum_{\alpha=1}^2 \zeta_\alpha^2, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad \delta_c = \operatorname{const} > 0. \end{aligned}$$

Удобно переписать рассматриваемую систему уравнений как одно эволюционное уравнение для вектора $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$. В этом случае имеем

$$\mathbf{C} \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \mathbf{D}\mathbf{u} + \mathbf{R}\mathbf{u} = \mathbf{f}(t), \quad 0 < t \leq T.$$

Операторы уравнения обладают следующими основными свойствами:

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}^* \geq \delta_c \mathbf{E}, \quad \mathbf{D} = \mathbf{D}^* \geq \delta_d \mathbf{E}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{R}^* \geq 0.$$

Здесь

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{D} &= \begin{pmatrix} -\operatorname{div} d_{11} \operatorname{grad} & -\operatorname{div} d_{12} \operatorname{grad} \\ -\operatorname{div} d_{21} \operatorname{grad} & -\operatorname{div} d_{22} \operatorname{grad} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{R} &= \begin{pmatrix} r & -r \\ -r & r \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Начальные условия для задачи в операторной формулировке будут иметь следующий вид:

$$\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0, \quad \mathbf{u}^0 = (u_1^0, u_2^0).$$

Далее проведем расщепление каждого из операторов \mathbf{C} , \mathbf{D} , \mathbf{R} следующим образом. Выделим диагональную часть операторов:

$$C = C_0 + C_1, \quad D = D_0 + D_1, \quad R = R_0 + R_1,$$

так что

$$C_0 = \begin{pmatrix} c_{11} & 0 \\ 0 & c_{22} \end{pmatrix}, \quad C_1 = \begin{pmatrix} 0 & c_{12} \\ c_{21} & 0 \end{pmatrix},$$

$$D_0 = \begin{pmatrix} -\operatorname{div} d_{11} \operatorname{grad} & 0 \\ 0 & -\operatorname{div} d_{22} \operatorname{grad} \end{pmatrix},$$

$$D_1 = \begin{pmatrix} 0 & -\operatorname{div} d_{12} \operatorname{grad} \\ -\operatorname{div} d_{21} \operatorname{grad} & 0 \end{pmatrix},$$

$$R_0 = \begin{pmatrix} r & 0 \\ 0 & r \end{pmatrix}, \quad R_1 = \begin{pmatrix} 0 & -r \\ -r & 0 \end{pmatrix}.$$

Для приближенного решения задачи Коши будем использовать следующую явно-неявную схему:

$$\begin{aligned} C_0 \frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} + C_1 \frac{y^n - y^{n-1}}{\tau} + \\ + D_0(\sigma y^{n+1} + (1 - 2\sigma)y^n + \sigma y^{n-1}) + D_1 y^n + \\ + R_0(\sigma y^{n+1} + (1 - 2\sigma)y^n + \sigma y^{n-1}) + R_1 y^n = \varphi^n, \\ n = 0, 1, \dots, N - 1. \end{aligned}$$

Можно показать, что эта трехслойная схема является безусловно устойчивой. Вычислительная реализация схемы базируется на решении двух стандартных эллиптических задач на каждом временном слое.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Barenblatt G. I., Zheltov I. P., Kochina I. N. Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks [Strata] // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. — 1960. — Vol. 24, no. 5. — P. 1286–1303.
- [2] Самарский А. А. Теория разностных схем. — Москва : Наука, 1989.
- [3] Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. — Москва : Наука, 1973.
- [4] Samarskii A. A., Matus P. P., Vabishchevich P. N. Difference schemes with operator factors. — Kluwer Academic Pub, 2002.
- [5] Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Аддитивные схемы для задач математической физики. — Москва : Наука, 1999.

- [6] Samarskii Alexander, Vabishchevich Petr. Additive Schemes for Systems of Time-Dependent Equations of Mathematical Physics // Numerical Methods and Applications / Ed. by Ivan Dimov, Ivan Lirkov, Svetozar Margelov, Zahari Zlatev. — Vol. 2542 of Lecture Notes in Computer Science. — Berlin : Springer, 2003. — P. 48–60.

Постобработка решений метода конечных элементов с эрмитовым базисом

Добронец Б.С.

Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия;

`BDobronets@yandex.ru`

Аннотация

В статье рассматривается стратегия повышения точности численного решения эрмитовых бикубических конечных элементов. Это достигается путем постобработки численного решения. Постобработка основана на решении в ячейке сетки специальной задачи метода наименьших квадратов

Ключевые слова: метод конечных элементов, эрмитовы элементы, постобработка, повышение точности, суперсходимоссть.

Благодарности: исследование проводилось при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 11-01-00224-а).

Введение

В работе на примере решения краевой задачи для эллиптического уравнения второго порядка показана возможность повышения точности решений метода конечных элементов (МКЭ) с эрмитовыми кубическими функциями. Это делается путем постобработки численного решения. Техника основана на решении специальной задачи наименьших квадратов [1].

Известно, что решения МКЭ с полиномиальными базисными функциями степени больше второй обладают в негативных нормах сходимостью более высокой, чем в нормах L_2 . На пратике это означает, что ошибка приближенного решения меняет знак в пределах ячейки сетки [3].

Предложенный алгоритм обладает свойством суперсходимости [2] и требует небольших вычислительных затрат. Результаты постобработки могут быть использованы для апостериорной оценки погрешности численных решений.

Метод конечных элементов

Рассмотрим краевую задачу для уравнения в частных производных

$$Lu = f, x \in \Omega, \tag{1}$$

$$u(x) = 0, x \in \partial\bar{\Omega}, \tag{2}$$

где $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ и $\partial\bar{\Omega}$ — граница, L — линейный эллиптический оператор второго порядка

$$Lu = - \sum_{i=1}^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}.$$

Будем использовать метод Галеркина

$$(Lu^h, v^h) = (f, v^h), \forall v^h \in S^h. \quad (3)$$

где

$$(u, v) = \int_{\Omega} u(x)v(x)d\Omega,$$

$$\|u\|_{L_2} = \sqrt{(u, u)}.$$

S^h — конечномерное подпространство $W_2^1([0, 1])$.

Интегрированием по частям можно переписать метод Галеркина в следующем виде:

$$\mathcal{L}(u^h, v^h) = \int_{\Omega} \sum_{i=1}^2 \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i} d\Omega = (f, v^h), \forall v^h \in S^h. \quad (4)$$

Численное решение $u^h \in S^h$ будем искать МКЭ с использованием кубических эрмитовых элементов [3]

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^N u_i \Phi_i(x).$$

Задача (4) сводится к системе линейных алгебраических уравнений

$$Au^h = F,$$

$$A = (a_{ij}), a_{ij} = \mathcal{L}(\Phi_i, \Phi_j), F_i = (f, \Phi_i).$$

Следующая теорема дает ответ о скорости сходимости МКЭ.

Теорема 1. [3] *Предположим, что степень пространства S^h равна $k-1$. Тогда приближение u^h метода конечных элементов отличается от истенного решения u на величину*

$$\|u - u^h\|_s \leq Ch^{k-s} \|u\|_k, \quad s \geq 2m - k,$$

$$\|u - u^h\|_s \leq Ch^{2(k-m)} \|u\|_k, \quad s \leq 2m - k.$$

Где в случае кубических элементов $k = 4$ и оператора второго порядка $m = 1$. Негативные нормы $s \leq 0$ определяются следующим образом

$$\|u\|_s = \max_g \frac{|(g, u)|}{\|g\|_{-s}}.$$

| h | $\ f - f_{LS}\ _{L_2}$ |
|------|------------------------|
| 1/2 | 0.147936 |
| 1/4 | 0.008425 |
| 1/8 | 0.0004950 |
| 1/16 | 0.0000513 |

Таблица 1: Сходимость $\|f - f_{LS}\|_{L_2}$.

Таким образом, если $s = -1$ и положить $v \equiv 1$, то

$$\|u - u^h\|_{-1} = \max_v \frac{|\int_{\Omega} (u - u^h)v dx|}{\|v\|_1} \geq \frac{|\int_{\Omega} (u - u^h) dx|}{(\text{mes } \Omega)^{1/2}}.$$

Это означает, что интеграл от ошибки $u - u^h$ по некоторой области Ω во много раз меньше оценки этой в норме L_2 .

Заметим, что невязка $L(u - u^h)$ ортогональна любой функции из S^h

$$(L(u - u^h), \phi) = 0, \forall \phi \in S^h.$$

или

$$((u - u^h), L^* \phi) = 0, \forall \phi \in S^h.$$

где L^* — сопряженный оператор к L . Пусть LS^h пространство состоящее из функций

$$LS^h = \{L^* \phi \mid \forall \phi \in S^h\}.$$

Ошибка $u - u^h$ ортогональна любой функции из LS^h

$$((u - u^h), f_{LS}) = 0, \forall f_{LS} \in LS^h.$$

Следовательно

$$((u - u^h), f) = ((u - u^h), f - f_{LS}), \forall f_{LS} \in LS^h.$$

Замечание 1. Справедливо неравенство

$$((u - u^h), f) \leq \|u - u^h\|_{L_2} \min_{f_{LS} \in LS^h} \|f - f_{LS}\|_{L_2}.$$

На примере функции $f = \sin(\pi x) \sin(\pi y)$, заданной на единичном квадрате, рассмотрим свойства пространства LS^h . Выберем f_{LS} как аппроксимацию функции f методом наименьших квадратов. В таб. 1. приведены оценки норм $\|f - f_{LS}\|_{L_2}$ при различных шагах равномерной сетки.

Результаты численного эксперимента, показали, что порядок сходимости не ниже 3.5

$$\|f - f_{LS}\|_{L_2} \leq Kh^{3.5}.$$

Постобработка

Пусть s некоторый полином [1] $s = \sum_{l=0}^n a_l \psi_l(x - x_0)$ такой, что

$$\|s - u^h\|_{L_2(\Omega')}^2 + \alpha \|Ls - f\|_{L_2(\Omega')}^2 \rightarrow \min, \quad (5)$$

где ψ_i — линейно независимые функции, Ω' — ячейка сетки, $\alpha > 0$ — параметр.

Задача (5) сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений

$$Ba = d, \quad B = (b_{ij}), \quad d = (d_i).$$

где $b_{ij} = (\psi_i, \psi_j) + \alpha(L\psi_i, L\psi_j)$ и $d_i = (u^h, \psi_i) + \alpha(L\psi_i, f)$. Таким образом, решив систему линейных алгебраических уравнений построим функцию s .

Рассмотрим оценку ошибки постобработки $u - s$. Представим s в виде суммы $s = u_l + v$, где u_l аппроксимация точного решения исходной задачи методом описанным выше

$$\|u - u_l\|_{L_2(\Omega')}^2 + \alpha \|Lu_l - f\|_{L_2(\Omega')}^2 \rightarrow \min. \quad (6)$$

Тогда (5) переписывается в виде

$$\|u^h - u_l - v\|_{L_2(\Omega')}^2 + \alpha \|Lu_l + Lv - f\|_{L_2(\Omega')}^2 \rightarrow \min,$$

и

$$\|u^h - u - v\|_{L_2(\Omega')}^2 + \alpha \|Lv\|_{L_2(\Omega')}^2 + \|u - u_l\|_{L_2(\Omega')}^2 + \alpha \|Lu_l - f\|_{L_2(\Omega')}^2 \rightarrow \min.$$

Следовательно

$$\|u^h - u - v\|_{L_2(\Omega')}^2 + \alpha \|Lv\|_{L_2(\Omega')}^2 \rightarrow \min.$$

Представим $v = v_1 + v_2$, где

$$Lv_1 \equiv 0.$$

Полагая $v_2 = 0$ получаем оценку

$$\|u^h - u - v_1 - v_2\|_{L_2(\Omega')}^2 + \alpha \|Lv_2\|_{L_2(\Omega')}^2 \leq \|u^h - u - v_1\|_{L_2(\Omega')}^2.$$

Заметим, что $\alpha \rightarrow \infty$ влечет $\|v_2\| \rightarrow 0$.

Представим v_1 в виде $v_1 = a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy$ как решение задачи

$$\|u^h - u - v_1\|_{L_2(\Omega')}^2 \rightarrow \min.$$

Оценим, например, a_0 . Как не сложно видеть

$$a_0 \sim (u^h - u, 1) / \text{mes}(\Omega') \leq \|u^h - u\|_{-1} \text{mes}(\Omega')^{-1/2}$$

Так в одномерном случае $a_0 \sim O(h^{4.5})$. С другой стороны

$$(u^h - u, 1) \leq \|u^h - u\|_{L_2} \|1 - 1_{SL}\|_{L_2},$$

что указывает на свойство суперсходимости постобработки.

Рассмотрим модельную задачу

$$-u'' = 12x^2 - 6x, x \in (0, 1),$$

$$u(0) = 0, u(1) = 0.$$

Точное решение

$$u = (1 - x)x^3.$$

В простейшем случае будем искать решение в виде

$$u^h = \sum_{i=1}^2 u_i \Phi_i(x, y).$$

Вектор решения $u_1 = -0.2, u_2 = -0.8$

В этом случае выполняются равенства

$$(u - u^h, 1) = 0, \quad (u - u^h, x) = 0$$

и постобработка s равна точному решению u .

Численные примеры

Рассмотрим краевую задачу для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка

$$-u'' + u = (\pi^2 + 1) \sin(\pi x), x \in (0, 1),$$

$$u(0) = 0, u(1) = 0.$$

Точное решение

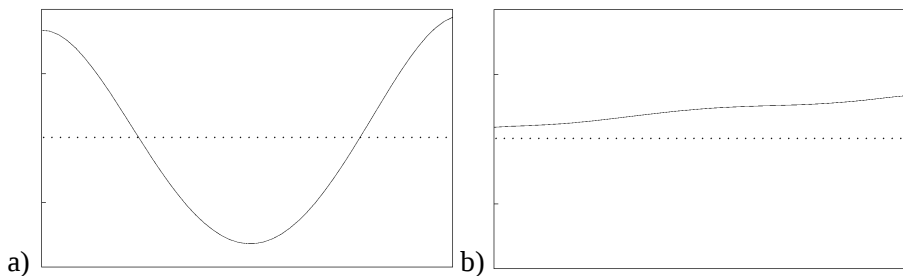
$$u = \sin(\pi x).$$

Для постобработки в одномерном случае использовались полиномы 5-й степени, $\alpha = 1$. В таблице 2 представлено сравнение ошибок численных решений МКЭ, ошибок постобработки и усредненной ошибки в ячейке сетки. Численные эксперименты показали, что увеличение степени полинома до 6-й практически не повышало точность постобработки.

На рис. 1 а) представлено типичное поведение ошибки численного решения в ячейке сетки, размер по вертикали $\sim \|u - u^h\|_{L_2}$, б) поведение ошибки постобработки, размер по вертикали $\sim \|u - s\|_{L_2}$.

| h | $\ u - u^h\ _{L_2}$ | $\ u - s\ _{L_2}$ | $\int_{\Omega'} u - u^h dx$ |
|-----|---------------------|-------------------|-----------------------------|
| 1/2 | 3.35E-03 | 1.51E-04 | 1.058E-04 |
| 1/4 | 2.19E-04 | 4.95E-06 | 4.872E-06 |
| 1/6 | 4.47E-05 | 6.71E-07 | 8.047E-07 |
| 1/8 | 1.43E-05 | 1.62E-07 | 2.242E-07 |

Таблица 2: Сравнение ошибок МКЭ, постобработки и усредненной ошибки.

Рис. 1: $u - u^h$ в ячейке, $u - s$ в ячейке

Рассмотрим краевую задачу

$$-\Delta u = f, (x, y) \in \Omega,$$

$$u = 0, (x, y) \in \partial\Omega.$$

где $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ и $\partial\Omega$ — граница Ω .

Положим

$$f(x, y) = 0.5\pi^2 \cos(0.5\pi x) \cos(0.5\pi y),$$

тогда точное решение

$$u(x, y) = \cos(0.5\pi x) \cos(0.5\pi y).$$

В двумерном случае постобработка оказалась весьма чувствительной к виду полиномов. Так использование полного полинома 5-й степени уменьшало ошибку в норме L_2 в 2–3 раза. Для улучшения свойств постобработки использовались Эрмитовы полиномы бипятой степени. Результаты приведены в таблице 3.

На рис. (2,а) приведена ошибка МКЭ в ячейке сетки, на рис. (2,б) представлено поведение ошибки постобработки решения. Единица шкалы по z рис. (б) в 10 раз меньше шкалы рис. (а). Как видно из рисунка (б) ошибка постобработки представляет практически билинейную функцию.

| h | $\ u - u^h\ _{L_2}$ | $\ u - s\ _{L_2}$ |
|-------|---------------------|-------------------|
| 0.5 | 0.00436993 | 0.00045358 |
| 0.25 | 0.00027572 | 0.00002087 |
| 0.125 | 0.00001746 | 0.00000103 |

Таблица 3: Сравнение ошибок МКЭ и постобработки

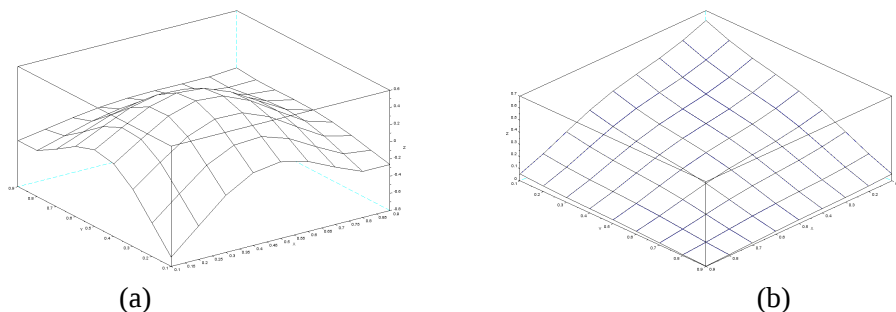


Рис. 2: (а) Поведение ошибки МКЭ и (б) ошибка постобработки в ячейке сетки

Заключение

Продемонстрирована эффективность постобработки для повышения точности решений МКЭ с эрмитовым базисом. Представленные алгоритмы постобработки могут быть использованы для апостериорных оценок погрешности решений конечных элементов. Одно из будущих направлений исследований является выбор вида обобщенных полиномов для постобработки.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Dobronets B.S. Numerical Methods using Defects. Reliable Computing 1(4), 1995, pp. 383–391.
- [2] Wahlbin L. B. Superconvergence in Galerkin Finite Element Methods, Lecture Notes in Math. 1605, Springer-Verlag, Berlin, 1995.
- [3] Стренг Г., Фикс Дж.. Теория метода конечных элементов / Перевод с английского В. И. Агошкова, В. А. Василенко, В. В. Шайдунова / Под редакцией Г. И. Марчука. - М.: Мир, 1977. - 350 с.

Об устойчивости разностных схем для нелинейных эволюционных задач

Матус П.П.

*Faculty of Mathematics and Natural Sciences, The John Paul II Catholic University of
Lublin, Poland;*

Институт математики НАН Беларуси, Минск, Беларусь;

matus@im.bas-net.by

Аннотация

В работе приводятся результаты исследования устойчивости разностных схем для смешанных задач для многомерного скалярного закона сохранения и квазилинейного параболического уравнения в предположениях только на входные данные. Приводится точная разностная схема для задачи Римана для квазилинейного уравнения переноса общего вида. Подчеркивается, что при анализе вопросов устойчивости (неустойчивости) разностных схем используются сеточные аналоги леммы Бихари (обобщение леммы Гронуолла на нелинейный случай) и дискретные аналоги теорем сравнения. Анализируется взаимосвязь монотонности и устойчивости схемы в нелинейном случае. Исследуется роль законов сохранения в проблеме возникновения неустойчивых решений для квазилинейных параболических уравнений и их аппроксимаций. Показывается необходимость усреднения источникового члена по нелинейности, согласованной с видом нелинейного коэффициента теплопроводности. Затрагиваются вопросы возникновения (невозникновения) ударных волн только в предположениях на свойства инвариантов Римана в начальный момент времени. На примере задачи Коши для нелинейного ОДУ показывается, что точное решение (которое мы не знаем) лежит между решением явной и чисто неявной разностных схем.

Ключевые слова: разностная схема, устойчивость, монотонность, теорема сравнения, лемма Бихари.

Благодарности: работа выполнена при поддержке Белорусского фонда фундаментальных исследований (№ Ф12Р-177 от 15 апреля 2012 г).

Введение

Понятие устойчивости (непрерывной зависимости решения от входных данных) является составной частью корректной постановки математической задачи по Адамару. Следовательно, в отличие от линейного случая, необходимо предварительно доказывать разрешимость задачи (существование и единственность решения). Это естественное требование в равной степени относится как к непрерывной, так и дискретной модели [1].

Второй аспект связан с тем, что анализ свойств решений нелинейных дифференциальных задач и их аппроксимаций проводят, как правило, в предположениях слабой нелинейности, т.е., когда накладываются определенные свойства на нелинейные коэффициенты, зависящие от решения, для всех $u \in R$. Это, во-первых, исключает из рассмотрения многие интересные прикладные задачи, а во вторых, этого просто нельзя делать хотя бы потому, что решение не относится к входным данным.

Как следствие, даже в квазилинейном случае мы приходим к необходимости оценивать в норме L_∞ все старшие производные, входящие в уравнение. Тем не менее, если это удастся, то мы на математическом уровне обнаруживаем наличие различных физических эффектов (ударные волны [2],[3], пограничные слои, локализация тепла в режимах с обострением [4],[5] и др.) только в зависимости от поведения входных данных.

Уравнение переноса

Некоторые конструктивные особенности исследования устойчивости разностных схем в нелинейном случае изучим на примере модельной задачи для уравнения переноса.

Начально-краевая задача

Очень часто при анализе свойств вычислительных методов ограничиваются рассмотрением задачи Коши. Во-первых, такие задачи почти не встречаются на практике, а во-вторых, они мало пригодны для начально-краевых задач. В области $\bar{Q}_T = \{(x, t) : 0 \leq x \leq l, 0 \leq t \leq T\}$ рассмотрим задачу для простейшего неоднородного квазилинейного уравнения с неоднородным граничным условием [2]

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = f(x, t), \quad u(x, 0) = u_0(x), \quad u(0, t) = \mu_1(t). \quad (1)$$

Говорить о корректности разностной схемы нет никакого смысла, если у нас нет соответствующего анализа корректности постановки задачи (1). Конечно, при условии $u > 0$ краевые условия на левой границе поставлены корректно. Такие предположения в нелинейных задачах типичны и поэтому подобные работы не представляют практического интереса. Единственно правильными будут предположения только на входные данные задачи, при которых будут выполнены нужные свойства на коэффициенты, зависящие от решения. В задаче (1) вместо $u \geq 0$, достаточно потребовать, чтобы

$$u_0(x) \geq 0, \quad 0 < x \leq l, \quad u_0(0) = \mu(0) > 0, \quad \mu(t) > 0, \quad f(x, t) \geq 0, \quad (x, t) \in \bar{Q}_T.$$

Возникновение ударных волн

Второй аспект исследования свойств соответствующих разностных схем (например, сходимости) связан с наличием определенных дифференциальных свойств у решения исходной задачи. Опять же будет неправильным предполагать соответствующую гладкость точного решения, так как в рамках фиксированной модели только свойства входных данных гарантируют принадлежность искомого решения соответствующему классу функций.

Как получить задачу для изучения появления ударных волн? Для этого анализируют задачу для производной и если она за конечный момент времени стремится к бесконечности (blow-up), то говорят об образовании разрывного решения. Дифференцируя уравнения (1) по x и записывая основное уравнения вдоль характеристического направления $\frac{dx}{dt} = u$, получаем задачу Коши для уравнения Риккати:

$$\frac{dv}{dt} = -v^2 + F(t), \quad F(t) = \frac{\partial f(x(t), t)}{\partial x}, \quad v(0) = v_0, \quad (2)$$

$$v_0 = \begin{cases} \mu_1(t) = (f(0, t) - \mu'(t)/\mu(t)), & x(t) = 0, \quad 0 < t \leq T \\ u'_0(x(0)), & 0 \leq x(0) \leq l, \quad t = 0. \end{cases}$$

Следуя работам [2],[6], нетрудно показать, что ударные волны отсутствуют, если только входные данные удовлетворяют условиям:

$$u_0 u'_0 - f(x, 0) > 0, \quad \mu'(t) \leq 0, \quad \frac{\partial f}{\partial t} \leq 0 \left(\frac{\partial f}{\partial x} \geq 0 \right). \quad (3)$$

Пример 1. Пусть $u'_0 \geq 0$ (ударная волна в случае задачи Коши для однородного уравнения не образуется) и

$$f(x, t) = -a^2 x + f_1(t), \quad a = \text{const} \neq 0.$$

Условие (3) $\frac{\partial f}{\partial x} \geq 0$ не выполнено. Задача Коши (2) решается точно и

$$v(t) = a \operatorname{tg} \left(-at + \operatorname{arctg} \frac{v_0}{a} \right), \quad t_1 = \frac{\pi}{2|a|} + \frac{1}{|a|} \operatorname{arctg} \frac{\|v_0\|_{C_\gamma}}{|a|},$$

т.е. ударная волна образуется в момент времени $t = t_1$.

Зачем нужно изучать поведение производных в квазилинейных уравнениях?

После доказательства разрешимости задачи, необходимо показать, что решение непрерывно зависит от входных данных задачи (устойчиво). Фактически, для этого нам необходимо получить априорную оценку:

$$\|\tilde{u} - u\|_{(1)} \leq k \|\tilde{\varphi} - \varphi\|_{(2)}, \quad k = \text{const} > 0, \quad (4)$$

где $\|\cdot\|_{(1)}, \|\cdot\|_{(2)}$ - некоторые нормы (обычно соболевского типа), $\varphi, \tilde{\varphi}$ - входные данные задачи (1) и соответствующей возмущенной проблемы. Причем в нелинейном случае из априорных оценок решений u, \tilde{u} не следует сама устойчивость решения. Обычно для этого требуется накладывать более жесткие условия на входные данные. Для доказательства оценки (4) (или доказательства устойчивости решения) необходимо получить сначала задачу для возмущения $\delta u = \tilde{u} - u$. Вычитая из возмущенных уравнений невозмущенные (1), находим

$$\delta u_t + u \delta u_x + \delta u \tilde{u}_x = \delta f, \quad (5)$$

$$\delta u(x, 0) = \tilde{u}_0 - u_0, \quad \delta u(0, t) = \tilde{\mu}(t) - \mu(t).$$

Следовательно, чтобы уравнение (5) имело смысл, необходимо потребовать непрерывность первой производной, т.е. $u(x, t) \in C_1^1$. Отметим, что в силу нелинейности задачи, уравнения (1) и (5) существенно отличаются друг от друга.

Возникающие проблемы в разностных схемах еще более сложные. Здесь могут появляться различные нерегулярности решения, обусловленные не природой непрерывной модели. Например, использование чисто неявных схем даже в случае уравнений с постоянными коэффициентами также опасно, как и использование явных алгоритмов. Если последние устойчивы при известных соотношениях Куранта, то первые не всегда являются абсолютно устойчивыми.

Пример 2. Рассмотрим задачу Коши для простейшего ОДУ:

$$\frac{du}{dt} = \alpha u, \quad \alpha = \text{const} > 0, \quad u(0) = u_0, \quad u(t) = u_0 e^{\alpha t}.$$

Использование чисто неявной разностной схемы

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = \alpha y_{n+1}, \quad y_0 = u_0, \quad y_n = y(t_n), \quad y_{n+1} = \frac{y_n}{1 - \tau \alpha},$$

с $\tau = 1/\alpha$ приводит к неустойчивости алгоритма в смысле разрушения решения за один временной шаг.

В работах [2],[7] исследовалась устойчивость обычных консервативных явных разностных разностных для квазилинейного уравнения переноса как в одномерном, так и многомерном случаях, включая уравнения более общего вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} = 0, \quad F'(u) > 0, \quad F''(u) > 0, \quad (6)$$

с помощью интегральной леммы Бихари, которая является обобщением леммы Гронуола-Беллмана на нелинейный случай, и её сеточных аналогов.

О монотонности разностной схемы

Существуют различные определения, которые иногда совершенно не пригодны для исследования монотонности алгоритма в нелинейном случае. Ориентируясь на определение, данное в известной монографии [8], мы говорим, что если из условий $\tilde{\varphi} - \varphi \geq 0$ ($\tilde{\varphi} - \varphi \leq 0$) вытекает, что $\tilde{y} - y \geq 0$ ($\tilde{y} - y \leq 0$), то схема называется монотонной. Отсюда следуют все известные определения, включая и определения связанные с выполнением принципа максимума или положительностью коэффициентов в линейном случае. Мало того, задача для изучения устойчивости и монотонности схемы в нелинейном случае одна и та же. Наиболее глубоко взаимоотношения монотонности и устойчивости схемы для многомерного уравнения переноса изучены в работе [7]. В частности, там показывается, что на ударной волне решение (сеточное) существует, единственно, монотонно, но не является устойчивым. Фактически, условие монотонности схемы эквивалентно условию локальной разрешимости вычислительного алгоритма.

Является ли условие Куранта необходимым условием устойчивости явной разностной схемы?

Не всегда. По крайней мере, исключения составляют точные разностные схемы.

Пример 3. Точная схема для проблемы Римана (6) с

$$u(x, 0) = u_0(x) = \begin{cases} u^L, & 0 < x \leq \xi, \\ u^R, & \xi < x \leq l, \end{cases}$$

$$u^L > u^R \geq 0,$$

$$u(0, t) = u^L, \quad 0 < t \leq T,$$

имеет вид обычной явной консервативной схемы против потока [2]

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} + \frac{F(u_i^n) - F(u_{i-1}^n)}{h} = 0, \quad t \in \omega_\tau, \quad x \in \omega_h.$$

с точной аппроксимацией скорости распространения поверхности разрыва (и соотношений Рэнкина-Гюгонио)

$$D = \frac{F(u^R) - F(u^L)}{u^R - u^L} = \frac{dx}{dt} = \frac{h}{\tau},$$

т.е. при условии $\tau D/h = 1$ схема является точной, но при этом условие Куранта не выполняется. Схема будет устойчива на ударной волне в смысле классического определения, когда возмущения входных данных удовлетворяют условиям

$$\frac{h}{\tau} = D = \tilde{D} = \frac{F(\tilde{u}^R) - F(\tilde{u}^L)}{\tilde{u}^R - \tilde{u}^L}.$$

О роли законов сохранения в задаче возникновения неустойчивых решений для квазилинейных параболических уравнений и их аппроксимации

Некоторые аспекты этого вопроса обсуждаются в работе [6]. Рассмотрим следующую начально-краевую задачу для квазилинейного параболического уравнения с нелинейным источником

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^m \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} \varphi(u) + f(u), \quad \varphi'(u) > 0, \quad (7)$$

$$u(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T], \quad u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \bar{\Omega}. \quad (8)$$

Для решения задачи (7)-(8) имеет место интегральный закон сохранения

$$E(t) = E(0), \quad E(t) = \int_0^t \left(\varphi'(u), \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 \right) dt + \sum_{\alpha=1}^m \left\| \frac{\partial \varphi(u)}{\partial x_\alpha} \right\|^2 - (F(u), 1), \quad (9)$$

$$f(u)\varphi'(u) = F'(u),$$

при этом начальная энергия $E(0) = E(u_0)$ простейшим образом определяется через начальную функцию. В работе [6] на примере степенных нелинейностей $\varphi'(u) = \chi_0|u|^\sigma$, $f(u) = \chi_1 u|u|^{p-1}$, $p > 1$, $\chi_1(p - \sigma - 1) > 0$, $\sigma \geq 0$, показывается, что если начальная энергия отрицательна $E(0) < 0$, то в задаче возникает режим с обострением или решение неограниченно возрастает за конечный момент времени. При этом на основе студенческой техники метода энергетических неравенств и неравенства Йенсена для выпуклых функций для $v(t) = \|u\|_{L_2(\Omega)}$ легко получить к дифференциальное неравенство

$$\frac{dv}{dt} > c_1 v^p, \quad v(0) = v_0.$$

Отсюда, на основе теоремы сравнения Чаплыгина, находим

$$\|u(t)\|_{L_\infty(\Omega)} \geq \|u(t)\|_{L_2(\Omega)} \geq \frac{\|u_0\|_{L_2(\Omega)}}{(1 - c_1(p-1)\|u_0\|_{L_2(\Omega)}^{p-1} t)^{1/(p-1)}},$$

где $c_1 = (p-1)/(p+1)$, а момент разрушения $T_1 \leq \frac{p+1}{(p-1)^2 \|u_0\|_{L_2(\Omega)}^{p-1}}$.

Аналогичные результаты получены и для разностных схем, аппроксимирующих дифференциальную задачу (7), (8).

Подобного рода исследования проводили многие авторы. Обзор работ можно найти, например, в [4],[5],[9]. Мы хотели лишь указать на нестандартные аппроксимации нелинейных коэффициентов таким образом, чтобы с одной стороны не

возникали нефизические сеточные режимы с обострением, а с другой стороны, выполнялись сеточные аналоги интегрального закона сохранения (9). Соответствующая разностная схема должна иметь следующий вид:

$$y_t = \sum_{k=1}^m (\varphi(y))_{\bar{x}_k x_k}^{(0.5)} + \frac{1}{\varphi(\hat{y}) - \varphi(y)} \int_{\varphi(y)}^{\varphi(\hat{y})} f(\xi) d\xi, \quad (10)$$

т.е. когда аппроксимация по нелинейности источникового члена согласована с видом нелинейного коэффициента теплопроводности.

О теоремах сравнения или как можно находить положение точного решения

При исследовании смешанных задач для нелинейных уравнений в частных производных часто используют метод интегральных соотношений типа интегралов энергии с последующим применением техники ОДУ, основанной на анализе так называемых верхних и нижних решений [10].

Пусть существует классическое решение $u(t) \in C^1(0, T] \cap C[0, T]$ задачи

$$\frac{du}{dt} = f(t, u), \quad 0 < t \leq T, \quad u(0) = u_0,$$

и её нижнее $\alpha(t)$ и верхнее $\beta(t)$ решения, удовлетворяющие неравенствам

$$\frac{d\alpha}{dt} \leq f(t, \alpha(t)), \quad 0 < t \leq T, \quad \alpha(0) = u_0, \quad (11)$$

$$\frac{d\beta}{dt} \geq f(t, \beta(t)), \quad 0 < t \leq T, \quad \beta(0) = u_0, \quad (12)$$

Тогда $\alpha \leq u(t) \leq \beta(t)$ для всех t , принадлежащих их общему интервалу существования. Введём область значений точного решения $D_u = \{u(t) : u_1 \leq u(t) \leq u_2, 0 \leq t \leq T\}$ и её ε -окрестность, $D_\varepsilon(u) = \{\tilde{u} : |\tilde{u} - u| < \varepsilon\}$, которая может быть и достаточно малой.

В дальнейшем ограничиваемся случаем, когда функция $f(t, v)$ удовлетворяет неравенствам $f_2(t)g_2(v) \leq f(t, v) \leq f_1(t)g_1(v)$, где $f_k(t), g_k(v), k = 1, 2$ - непрерывные, положительные и монотонно возрастающие функции при всех $t \in [0, T], v \in D_\varepsilon(u)$. Решение $u(t)$ в этом случае является нижним и верхним решением следующих дифференциальных задач

$$\frac{dv_1}{dt} = f_1(t)g_1(v_1), \quad \frac{dv_2}{dt} = f_2(t)g_2(v_2), \quad v_k(0) = u_0, \quad k = 1, 2. \quad (13)$$

На отрезке $[0, T]$ рассматривается произвольная неравномерная сетка $\bar{\omega}_\tau = \omega_\tau \cup \{0\}, \omega_\tau = \{t_{n+1} = t_n + \tau_n, \tau_n > 0, n = 0, 1, \dots, N_0 - 1, t_0 = 0, t_{N_0} = T\}$, на которой дифференциальные задачи (11)-(13) аппроксимируем разностными:

$$\frac{v_k^{n+1} - v_k^n}{\tau_n} = \varphi_k(t_{n+1})q_k(v_k^{n+1}), \quad v_k^0 = u_0, \quad k = 1, 2.$$

$$\frac{\alpha_\tau^{n+1} - \alpha_\tau^n}{\tau_n} \leq f_1(t_n)g_1(\alpha_\tau^n), \quad \alpha_\tau^0 = u_0, \quad (14)$$

$$\frac{\beta_\tau^{n+1} - \beta_\tau^n}{\tau_n} \geq f_2(t_{n+1})g_2(\beta_\tau^{n+1}), \quad \beta_\tau^0 = u_0, \quad (15)$$

где шаблонные функционалы

$$\varphi(t_{n+1}) = \frac{1}{\tau_n} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_k(t) dt, \quad g_k(v_k^{n+1}) = \left[\frac{1}{v_k^{n+1} - v_k^n} \int_{v_k^n}^{v_k^{n+1}} \frac{dv}{g_k(v)} \right]^{-1},$$

выбираются из условия точной разностной схемы, а $\alpha_\tau^n, \beta_\tau^n$ - нижнее и верхнее приближенные значения соответствующих задач Коши для дифференциальных неравенств (11)-(12). Отметим, что соответствующий дискретный аналог нижней оценки $\alpha \leq v_1$ может быть получен при использовании явной аппроксимации, а верхней $v_2 \leq \beta$ - при использовании неявной.

Теорема. Пусть существуют классические решения задач Коши (13) и сеточные функции $\alpha_\tau^n, \beta_\tau^n \in D_\varepsilon(u), n = 0, 1, \dots, N_0$, удовлетворяющие неравенствам (14),(15). Тогда

$$\alpha_\tau^m \leq v_1^m, \quad \beta_\tau^m \geq v_2^m, \quad m = 0, 1, \dots, N_0.$$

Следствие. Пусть существуют единственные решения явной и неявной разностных схем вида

$$y_{\alpha t} = f_1(t_n)g_1(y_\alpha^n), \quad y_{\beta t} = f_2(t_{n+1})g_2(y_\beta^{n+1}), \quad y_\alpha^0 = y_\beta^0 = u_0,$$

$y_\alpha, y_\beta \in D_\varepsilon(u)$ и выполняется неравенства (14),(15). Тогда для всех соответствующих $t_n \in \bar{\omega}_\tau$ имеют место неравенства

$$\alpha_\tau^n \leq y_\alpha^n \leq v_1^n, \quad \beta_\tau^n \geq y_\beta^n \geq v_2^n, \quad n = 0, 1, \dots, N_0. \quad (16)$$

Пример 4. В случае степенных нелинейностей $f(t, u) = t^r u^p, r \geq 0, p > 1$ в формулах (16)

$$v_1^n = v_2^n = u_n = u(t_n) = \frac{u_0}{\left(1 - \frac{p-1}{r+1} u_0^{p-1} t_n^{r+1}\right)^{1/(p-1)}}.$$

Следовательно, точное решение(которое мы обычно не знаем) лежит между решениями явной и неявной разностных задач.

Данный аппарат дискретных теорем вложения успешно применяется для анализа устойчивости(неустойчивости) разностных схем, аппроксимирующие сложные квазилинейные задачи математической физики, включая и режимы с обострением [6],[10].

Замечание 1. В работах [11],[12],[13] исследовалась устойчивость разностных схем для уравнений газовой динамики в инвариантах Римана. С точки зрения вычислительных методов для расчёта ударных волн в этих работах ничего нового не содержится. Более того, специалисты в области математического моделирования скажут, что ничего не надо изобретать. Есть соответствующие пакеты прикладных программ. Кроме того, схемы в инвариантах Римана нельзя применять в областях разрывов, так как они не являются консервативными. Но ни один пакет программ не даёт ответ на вопрос: как управлять входными данными, чтобы ударные волны не появлялись или наоборот. В упомянутых выше работах получены условия на инварианты Римана при $t = 0$, когда, во-первых, задача будет корректно поставленной и при каких условиях на входные данные появляются ударные волны.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Matus P. Stability of difference schemes for nonlinear time-dependent problems // Comput. Meth. Appl. Math. 3(2): 313-329, 2003.
- [2] Matus P., Lemeshevsky S. Stability and monotonicity of difference schemes for nonlinear scalar conservation laws and monotonicity of difference schemes for nonlinear scalar conservation laws and multilimensional quasi-linear parabolic equations// Comput. Meth. Appl. Math., 9(3): 253-280, 2009.
- [3] Matus P. Stability with respect to the initial data and monotonicity of an implicit difference scheme for a homogeneous porous medium equation with a quadratic nonlinearity// Diff. Eq. 46(7): 1019-1029, 2010.
- [4] Matus P. Well-posedness of difference schemes for semilinear parabolic equations with weak solution// Comput. Meth. Math. Phys., 50(12): 2044-2063, 2010.
- [5] Matus P., Lemeshevsky S. and Kandzatsink A. Well posedness and blow-up for IBVP for semilinear parabolic equation and numerical methods// Comput. Meth. Appl. Math., 10(4): 395-420, 2010.
- [6] Матус П.П. О роли законов сохранения в задаче возникновения неустойчивых решений для квазилинейных параболических уравнений// Дифференц. уравнения, 2013, том 49, №7, с. 911-922.
- [7] Matus P. P., Panayotova I. N., and Polyakov D. B. Stability and Monotonicity of a Conservative Difference Scheme for a Multidimensional Nonlinear Scalar Conservation Law// Differential Equations, 2012, Vol. 48, №7, pp. 982-989.

- [8] Godlewski E. and Raviart P. - A. Hyperbolic Systems of Conservation Laws New York, 1996.
- [9] Jovanovich B., Lapinska-Chrzonowioz., Matus A. and Matus P. Stability of finite-difference schemes for semilinear multidimensional parabolic equations// Comput. Meth. Appl. Math., 12(3): 289-305, 2012.
- [10] Матус П.П., Парадинска А., Щадинский Д.А. Дискретные аналоги и их применения // Докл. НАН Беларуси, 2013, Т. 57, № 4, с.16-20.
- [11] Matus P. and Polyakov D. Stability and convergence of the difference schemes for equations of isentropic gas dynamics in Lagrangian Coordinates// Publ. Inst. Math. 2012, Vol. 91(104) pp. 137-153.
- [12] Матус П.П., Чуйко М.М. Исследование устойчивости и сходимости разностных схем для политропного газа с дозвуковыми течениями // Дифференц. уравнения, 2009, Т. 45, №7, с.1053-1064.
- [13] Матус П.П., Марцинкевич Г.Л., Чуйко М.М. Устойчивость разностных схем в инвариантах Римана для политропного газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2010, Т. 50, №6, с.1078-1091.

Суперкомпьютерные технологии решения больших задач в Сибирском суперкомпьютерном центре

Михайленко Б.Г.¹, Глинский Б.М.¹, Черных И.Г.¹

¹*Институт вычислительной математики и математической геофизики
Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия;*

mikh@sscc.ru

gbm@sscc.ru

chernykh@ssd.sccc.ru

Аннотация

В качестве одного из подразделений ИВМиМГ СО РАН создан Центр коллективного пользования «Сибирский суперкомпьютерный центр» (ССКЦ) с пиковой производительностью 115 TFlops. Основные задачи центра: разработка и использование суперкомпьютерных технологий для математического моделирования различных задач, решаемых в институтах СО РАН; обеспечение работ институтов СО РАН и университетов Сибири по математическому моделированию в фундаментальных и прикладных исследованиях; обучение специалистов СО РАН и студентов университетов методам параллельных вычислений на суперкомпьютерах, методам моделирования больших задач. Кроме ССКЦ в Новосибирске, суперкомпьютерные центры СО РАН созданы в Иркутске, Красноярске, Томске, Омске. Координация работ по развитию суперкомпьютерных центров СО РАН, осуществляется Советом по супервычислениям при Президиуме СО РАН.

Ключевые слова: суперкомпьютерный центр, параллельные вычисления.

Благодарности: работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 13-07-00589, Междисциплинарных интеграционных проектов СО РАН № 130, №39.

Введение

В настоящее время в ССКЦ имеются два кластера, которые используются в режиме коллективного пользования институтами СО РАН. Один из кластеров построен на основе вычислительных узлов с Intel Xeon (архитектура MPP), пиковая производительность 30 TFlop/s, программирование с применением MPI и OpenMP, другой с гибридным расширением на GPU NVIDIA Tesla M2090 (архитектура GPGPU), пиковая производительность 84 TFlop/s, параллельное программирование при помощи C/C++ CUDA и OpenCL. Особенностью программирования задач на кластере с MPP-архитектурой, ориентированной на решение больших задач, прежде всего 3-D, является применения параллельных языков MPI и OpenMP, поскольку это обусловлено архитектурой кластера, построенного с использованием многопроцессорных серверов с общей памятью (SMP). При таком подходе внутри каждого

вычислительного модуля несколько потоков с помощью OpenMP. поддерживаются две современных парадигмы параллельных вычислений – MPI для систем с распределенной памятью (кластеров) и OpenMP для систем с общей памятью. Схема вычислений предусматривает запуск на каждый вычислительный узел кластера по одному MPI-процессу, который запускает внутри каждого вычислительного модуля несколько потоков с помощью OpenMP.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 13-07-00589, Междисциплинарных интеграционных проектов СО РАН № 130, №39

Другая технология высокопроизводительных вычислений связана с реализацией алгоритма на гибридной архитектуре: суперкомпьютер состоит из набора соединенных между собой узлов, для обмена данными используется MPI; каждый узел состоит из 1 CPU и 3 GPU; на каждом узле запускается 1 процесс MPI, управляющий вычислениями (процесс выполняется на CPU); из MPI процесса запускаются нити (threads) CUDA, каждая из которых предназначена для выполнения на своем ядре (CUDA core); для управления тремя GPU из одного CPU используется технология Multi-GPU. ЦКП ССКЦ СО РАН предоставляет вычислительные и консалтинговые услуги 19 академическим институтам Сибирского отделения и 3 университетам, более 160 пользователей используют ресурсы центра для решения своих задач. Решается большое количество задач из различных областей знаний, в том числе, определенных приоритетными направлениями развития науки и техники.

Архитектурные особенности ЦКП ССКЦ

В настоящее время в ССКЦ имеются два кластера, которые используются в режиме коллективного пользования институтами СО РАН. Один из кластеров построен на основе вычислительных узлов с Intel Xeon (архитектура MPP), пиковая производительность 30 TFlop/s, программирование с применением MPI и OpenMP, другой с гибридным расширением на GPU NVIDIA Tesla M2090 (архитектура GPGPU), пиковая производительность 84 TFlop/s, параллельное программирование при помощи C/C++ CUDA и OpenCL. Имеется кластерная файловая система Ibrix, содержащая 4 сервера и 32 Тбайта памяти. Кроме того, в состав ССКЦ входит сервер с общей памятью HP ProLiant DL980 G7 с четырьмя 10-ядерными процессорами Intel E7-4870 с тактовой частотой 2,4 ГГц, оперативной памятью 512 Гбайт и 8 SAS дисками по 300 Гбайт. Пиковая производительность сервера в текущей конфигурации составляет 384 Гфлопс. В апреле 2012 года сервер включён в кластер НКС-30Т как нестандартный вычислительный узел. На рисунке 1 приведена структурная схема гетерогенного кластера НКС 30Т+GPU. В состав кластера входят: 576 процессоров (2688 ядер) Intel Xeon E5450/E5540/X5670; 120 процессоров GPU - Tesla M 2090 (61440 ядер); SMP сервер с общей памятью hp DL980 G7 (8 процессоров, 80 ядер) Intel E7-4870, оперативная память 1024 Гбайт); кластерная файловая система IBRIX (4 сервера, 32 Тбайта). Таким образом, в состав гетеро-

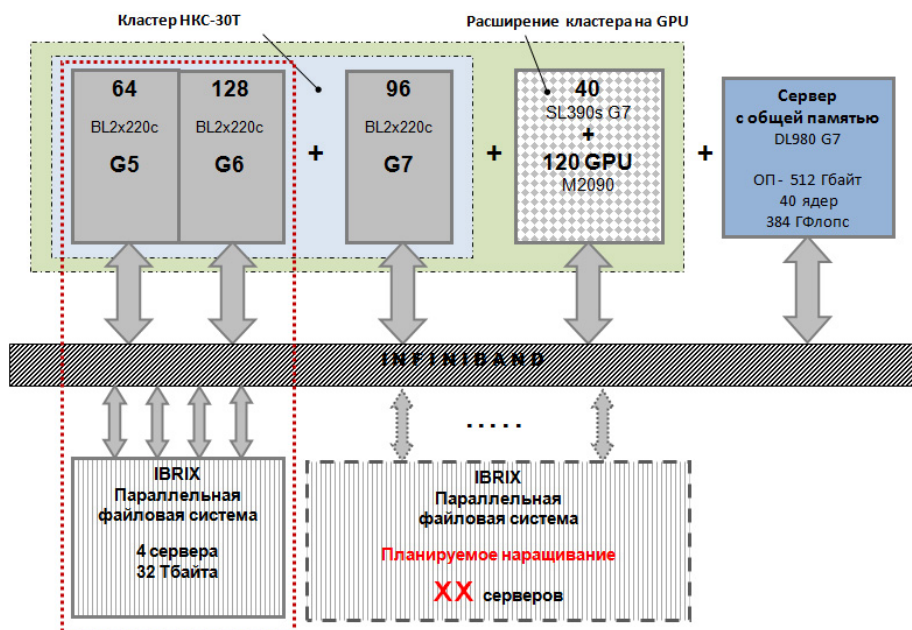


Рис. 1: Структурная схема соединений основных узлов кластера.

генного кластера входят вычислительные блоки с MPP-архитектурой, гибридной архитектурой с использованием карт NVIDIA Tesla M2090 (40 узлов, на каждый узел 3 карты) и SMP-архитектурой. Все узлы кластера связаны между собой через Infiniband QDR. Такая структура кластера отвечает требованиям центров коллективного пользования, поскольку приходится решать самые разнообразные задачи из различных областей знаний и наличие нескольких архитектур в центре даёт возможность выбрать оптимальную исходя из специфики решения задачи. Например, для плохо распараллеливаемой задачи часто используют SMP-архитектуру. Принципиально имеется возможность, при такой схеме построения центра, задействовать все ресурсы гетерогенного кластера при решении одной задачи. Подробнее о составе технических и программных средств, пакетах прикладных программ можно посмотреть на сайте ССКЦ <http://www2.sscs.ru/>. Особенностью программирования задач на кластере с MPP-архитектурой, ориентированной на решение больших задач, прежде всего 3-D, является применения параллельных языков MPI и OpenMP, поскольку это обусловлено архитектурой кластера, построенного с использованием многопроцессорных серверов с общей памятью (SMP). При таком подходе внутри каждого вычислительного модуля формируются несколько потоков с помощью OpenMP. Таким образом, поддерживаются две современных парадигмы параллельных вычислений – MPI для систем с распределенной памятью (кластеров) и OpenMP для систем с общей памятью. Схема вычислений предусматривает запуск на каждый вычислительный узел кластера по одному MPI-процессу,

который запускает внутри каждого вычислительного модуля несколько потоков с помощью OpenMP. Другая технология высокопроизводительных вычислений связана с реализацией параллельного алгоритма на гибридной архитектуре следующего вида: суперкомпьютер состоит из набора соединенных между собой узлов, для обмена данными используется MPI; каждый узел состоит из 1 CPU и 3 GPU; на каждом узле запускается 1 процесс MPI, управляющий вычислениями (процесс выполняется на CPU); из MPI процесса запускаются нити (threads) CUDA, каждая из которых предназначена для выполнения на своем ядре (CUDA core); для управления тремя GPU из одного CPU используется технология Multi-GPU.

Перспективы развития ЦКП ССКЦ

Необходимость наращивания мощности ЦКП ССКЦ обусловлена моральным старением оборудования и возрастающими потребностями институтов Сибирского отделения в использовании современных вычислительных средств для решения задач в следующих исследуемых областях: математического моделирования свойств наноматериалов; развития нанотехнологий в физике, химии, биологии, геологии, нанoeлектронике; создание трёхмерных моделей Земли; трёхмерных моделей атмосферы; синтеза веществ в фармакологии; моделирование физики атмосферы и океана; аэродинамики летательных аппаратов; лазерной оптики (трёхмерные связанные резонаторы) и др. В настоящее время ЦКП ССКЦ обслуживает 19 институтов СО РАН и 3 университета, +160 пользователей решают разнообразные научно-технические задачи. Однако, по вычислительным мощностям ССКЦ (115 ТФлопс) находится на одном из последних мест среди организаций занимающихся высокопроизводительными вычислениями. Достаточно упомянуть: МГУ, кластер «Ломоносов» (1700 ТФлопс), МСЦ (227 ТФлопс; запущен кластер на Intel Xeon Phi (523 ТФлопс), который должен служить прототипом суперкомпьютера производительностью 10 ПФлопс (10000 ТФлопс), ЮрГУ запущен кластер на Intel Xeon Phi (236 ТФлопс). ССКЦ совместно с корпорацией HP и ООО «Нонолет - ИТ» разработала проект гетерогенного кластера с использованием ускорителей Intel Phi. Последнее обстоятельство очень важно для программистов, поскольку используется единая система команд, в отличие от имеющегося в ССКЦ кластера с GPU NVidia Tesla M2090. В последнем для программирования графических карт необходимо применять специализированный язык CUDA, что является большим препятствием для широкого применения гибридного кластера пользователями. Создание кластера нового поколения позволит существенно повысить эффективность решения проблем по вышеперечисленным направлениям, проектам и грантам. В основе предлагаемого решения лежит модульное серверное шасси HP Proliant SL6500, занимающее в стойке 4U пространства и вмещающего четыре 2-х юнитовых сервера половинной ширины HP Proliant SL250 Gen8. Каждое шасси обеспечивает централизованное электропитание и охлаждение установленных в него серверов,

для этого в шасси установлено 4 высокоэффективных блока питания мощностью 1200 Вт каждый и 8 отказоустойчивых вентиляторов охлаждения. Высокую производительность серверов HP SL250Gen8 обеспечивают два центральных восьми ядерных процессора последнего поколения Intel® Xeon® Processor E5-2670. (20M Cache, 2.60 GHz, 8.00 GT/s Intel® QPI), 64 Гбайта оперативной памяти и два вычислительных модуля Intel Xeon Phi 5110P с 8 ГБ локальной памяти. Для установки операционной системы предусмотрен жесткий диск SATA на 500 Гбайт. Сопроцессоры Intel Xeon Phi 5110P обеспечивают более высокую производительность при пониженном энергопотреблении. Они демонстрируют производительность с удвоенной точностью на уровне 1,011 гигафлопс (1,01 терафлопс) и поддерживают 8 Гбайт памяти GDDR5 с пропускной способностью 320 Гбит/с. С показателем TDP на уровне 225 Вт сопроцессоры Intel Xeon Phi 5110P с пассивным охлаждением обеспечивают энергоэффективность, которая оптимально подойдет для сред с высокой плотностью размещения вычислительного оборудования, и предназначены для рабочих задач с ограничениями по скорости вычислений, включая разработку цифрового контента и исследования в области энергетики. Применение 102 таких серверов обеспечат производительность вычислений с двойной точностью на уровне $R_{peak} = 1011 \text{ GFlop} * 204 = 206, 244 \text{ TFlops}$. Для высокоскоростного обмена данными между узлами кластера в каждом сервере имеется адаптер FDR Infiniband (QSFP) подключенный к коммутатору Voltaire IB, который обеспечивает интеграцию с параллельной кластерной системой хранения данных. Следует отметить, что именно по такому принципу построен лидер последнего списка Top500 китайский кластер Tianhe-2. Создание данного кластера и его пиковая производительность полностью зависят от финансирования, выделяемого Президиумом СО РАН.

Подготовка кадров

Высокая квалификация сотрудников, большие задел и опыт сотрудников института позволяют не только обеспечивать научную составляющую работ ССКЦ, но успешно готовить новые кадры. Несмотря на большую востребованность на рынке труда специалистов в параллельном программировании и их постоянный отток из института, столь же постоянно кадровый состав восстанавливается за счет успешной работы базирующихся в институте кафедрах: Математических методов геофизики НГУ; Вычислительной математики НГУ; Параллельных вычислений НГУ; Вычислительных систем НГУ; Параллельных вычислительных технологий НГУ. Начиная с 2002 года Отделом высокопроизводительных вычислений института регулярно проводятся весенние и осенние школы для пользователей ССКЦ и студентов по параллельным алгоритмам и программам. При институте создан Учебный Научный Центр (УНЦ) на 12 компьютеризированных рабочих мест, который по оптоволоконной линии связан с ССКЦ. В этом центре проводятся занятия

со студентами, а также на его базе проводятся летние и зимние школы по параллельному программированию, школы Intel по высокопроизводительным вычислительным технологиям. В 2012 году на базе ИВМиМГ проведена международная конференция «Параллельные и вычислительные технологии 2012», в работе которой приняли участие 242 участника из России, Казахстана, Украины, Германии, Франции, США. <http://agora.guru.ru/display.php?conf=pavt2012> При поддержке специалистов NVIDIA на вычислительных ресурсах кластера в апреле 2012 года организована трёхдневная школа по технологии NVIDIA CUDA, в которой прошли обучение 118 слушателей из институтов СО РАН, ВУЗов и фирм, Программа и учебные материалы школы размещены на страничке <http://www2.sccc.ru/Seminars/Nvidia%20Cuda-1.htm> В декабре 2012 года проведена школа по параллельному программированию гибридных кластеров, см. <http://www2.sccc.ru/Seminars/Shool-2012.htm> Организован регулярный семинар «Архитектура, системное и прикладное программное обеспечение кластерных суперЭВМ» на базе ССКЦ ИВМиМГ СО РАН, кафедры Вычислительных систем НГУ и Центра Компетенции по высокопроизводительным вычислениям СО РАН - Intel, Презентации семинаров размещаются на страничке <http://www2.sccc.ru/Seminars/NEW/Seminars.htm>

Решение прикладных задач

ЦКП ССКЦ СО РАН предоставляет вычислительные и консалтинговые услуги 19 академическим институтам Сибирского отделения и 3 университетам, более 160 пользователей используют ресурсы центра для решения своих задач. Решается большое количество задач из различных областей знаний, в том числе, определенных приоритетными направлениями развития науки и техники: Индустрия наносистем - ИВМиМГ, ИК, ИТПМ, ИХКиГ, ИФП, ИЯФ, ИХиХТ (Красноярск), ОНЦ (Омск), ИКЗ (Тюмень); Информационно-телекоммуникационные системы - ИВТ, ИВМиМГ, ИГ, ИНХ, НГУ, НГТУ, ИЦиГ, ИЯФ; Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика - ИВТ, ИВМиМГ, ИГ, ИК, ИТ, ИХКиГ, ИЯФ, НГУ, НГТУ, ИНГиГ; Науки о жизни - ИХБиФМ, ИЦиГ, ИВМиМГ, НГУ, ИГ, ИКЗ (Тюмень), ОФ ИМ (Омск); Рациональное природопользование - ИВМиМГ, ИНГиГ, ИТ, НГУ, ИХиХТ (Красноярск), ИКЗ (Тюмень); Транспортные и космические системы - ИТПМ, НГТУ.

На рисунке 2 приведена диаграмма распределения процессорного времени ССКЦ. Видно, что основными пользователями центра являются научные сотрудники СО РАН Из большого количества задач, решаемых в центре, приведем только некоторые из набора задач ИВМиМГ. Задачи обработки данных в физике высоких энергий На части кластера НКС-30Т развернута, основанная на KVM, виртуализованная вычислительная среда, используемая для обработки данных физических экспериментов в физике высоких энергий, осуществляемых в ИЯФ СО РАН. Обмен

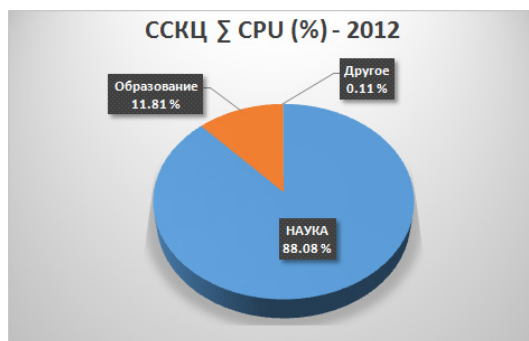


Рис. 2: Диаграмма распределения процессорного времени за 2012г.

данными между ИЯФ СО РАН и ССКЦ осуществляется через суперкомпьютерную сеть ННЦ (10 Гбит/с) [1]. Эксперимент КЕДР: работа проводится на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-4М с детектором КЕДР. Эксперименты в области рождения ψ -резонансов (J/ψ , $\psi(2S)$, $\psi(3770)$) и τ -лептона. Эксперимент ATLAS: работа проводится на Большом адронном коллайдере (БАК) (ЦЕРН, Швейцария). Анализ данных эксперимента ATLAS в рамках ATLAS Exotics Working Group. Эксперимент СНД: работа проводится на коллайдере ВЭПП-2000 со Сферическим нейтральным детектором (СНД). Изучение процессов электрон-позитронной аннигиляции в области энергии до 2 ГэВ в системе центра масс. Имитационное моделирование алгоритмов для экзафлопсных суперкомпьютеров. В ИВМиМГ в настоящее время развивается новое направление исследований, «Развитие суперкомпьютерных технологий и методов моделирования архитектур и алгоритмов для пета- и экза-флопсных супер-ЭВМ» (руководители проекта д.т.н. Глинский Б.М., д.т.н. Родионов А.С.). Направление, связано с исследования свойств масштабируемости параллельных алгоритмов при их реализации на будущих суперЭВМ экзафлопсной производительности. Оценить поведение алгоритмов, разработать модифицированные схемы вычислений можно уже сейчас путем реализации их на имитационной модели, отображающей тысячи и миллионы вычислительных ядер. Имитационная модель позволяет выявить узкие места в алгоритмах, понять, как нужно модифицировать алгоритм, какие параметры необходимо настраивать при его масштабировании на большое количество ядер [3, 2]. Для моделирования используется система моделирования AGNES (AGent NEtwork Simulator), установленная на кластере ССКЦ, см. <http://www2.sssc.ru/PPP/Mat-Libr/agnes.htm>. Все расчеты проводились на кластере НКС-30Т+GPU. Приведем примеры моделирования двух задач: имитация распределенного статистического моделирования (задача динамики разреженного газа по методу ПСМ, к.ф.-м.н. М.А. Марченко); численное моделирование 3D сейсмических полей (к.ф.-м.н. Д.А. Каравеев). В первой задаче исходные данные для имитационного моделирования получены с использованием библиотеки PARMONC, предназначенной для использо-

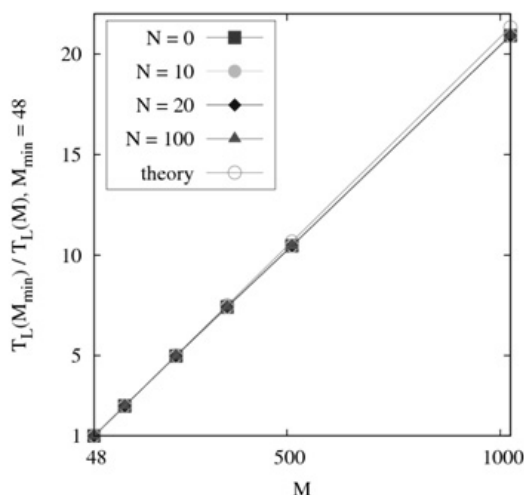


Рис. 3: Сравнение ускорения до $M=1000$. Результаты ускорения для модели совпадают с ускорением при расчётах с использованием пакета PARMONC.

вания на современных суперкомпьютерах тера- и петафлопсного уровня [4]. Библиотека также установлена на кластере ССКЦ, см. <http://www2.sccc.ru/SORAN-INTEL/paper/2011/parmonc.pdf>. Схема вычислений по этой задаче требует наличие ядер-«сборщиков», которые периодически собирают статистику с ядер-«вычислителей» [3]. Проведенное имитационное моделирование показало, что при большом числе используемых вычислительных ядер (больше 10000) реальное ускорение от распараллеливания существенно отличается от теоретического, что связано с большой загрузкой выделенных ядер-«сборщиков», которые обрабатывают поступающие пакеты данных с ядер-«вычислителей».

При этом до 1000 ядер ускорение в модели совпадает с ускорением в реальных расчетах, см. рисунок 3. Ускорение от распараллеливания при расчётах на M ядрах определим так: $SL(M) = TL(M_{min})/TL(M)$, где $TL(M)$ – машинное время на центральном ядре- «сборщике», затраченное на моделирование и сохранение выборочных средних для L реализаций случайной оценки; M_{min} – наименьшее число ядер, использованных при расчётах. В двухуровневом варианте ядра-«вычислители» были поделены на N равных частей ($N = 10, 20, 100$), для каждой из которых данные с ядер-«вычислителей» сначала отправлялись на свое выделенное промежуточное ядро-«сборщик». В свою очередь, N промежуточных ядер-«сборщиков» отправляли данные на главное ядро-«сборщик». В одноуровневом варианте (будем считать, что число промежуточных ядер-«сборщиков» равно нулю: $N = 0$) данные с ядер-«вычислителей» непосредственно отправлялись на главное ядро-«сборщик».

Следующий результат имитационного моделирования приведен на рисунке 4.

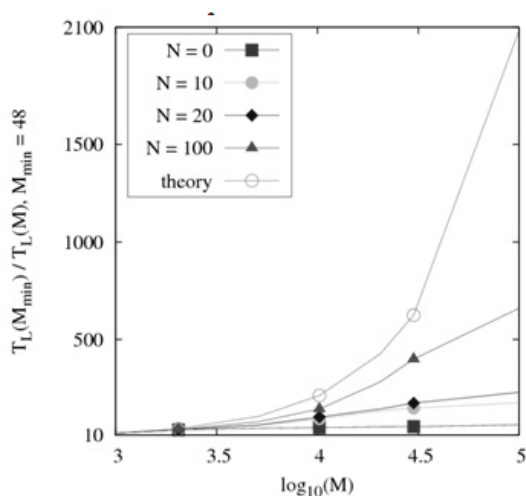


Рис. 4: Сравнение ускорения распределённого статистического моделирования для разных вариантов организации обмена данными для числа ядер M до 100 000 (горизонтальная ось – в логарифмическом масштабе).

В данном случае была использована логарифмическая шкала для количества ядер. Видно сильное отклонение от теоретической кривой. Еще большее расхождение получилось при дальнейшем увеличении количества вычислительных ядер, 500000 и более. На основе анализа полученных результатов был сделан вывод о том, что схему вычислений необходимо изменять. В частности, были предложены многоуровневые схемы для ядер сборщиков. Для имитации сеточных методов при численном моделировании 3D сейсмических полей реализован класс функциональных агентов Grid — узел-вычислитель, имитирующий расчет сеточных методов на одном вычислителе. Моделируются вычисления, когда область исследования режется вдоль одной оси, и полученные области загружаются на вычислители. Таким образом, получается, что у каждого вычислителя есть пересечение по данным максимум с 2-ми вычислителями («крайние» вычислители обмениваются только с одним соседом). Каждый вычислитель, на первом шаге рассчитывает свои граничные области, затем асинхронно передает насчитанные результаты соседям. Расчет внутренних областей идет на втором шаге, получив данные от соседей и просчитав изменение своей области, агент переходит к шагу один. Общие результаты изменения времени счета в зависимости от количества доступных ядер GPU (при пропорциональном увеличении размера 3D модели) в логарифмическом масштабе приведены на рисунке 5.

Показано хорошее соответствие экспериментальных и модельных результатов на начальном участке кривой (до 30720 ядер). При значительном увеличении количества вычислительных узлов с пропорциональным увеличением размера 3D модели время счета увеличивается, но незначительно (при росте числа узлов от 7680

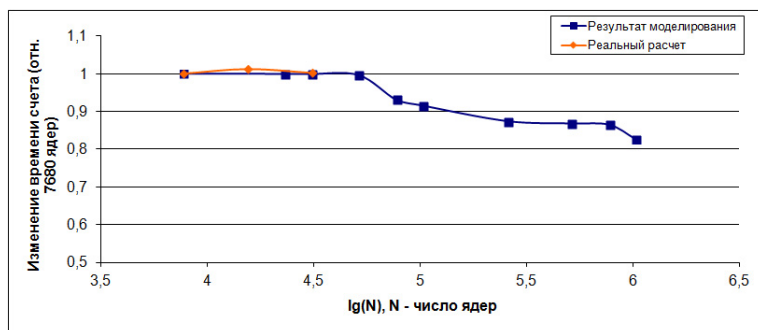


Рис. 5: Изменение времени расчета алгоритма численного моделирования в зависимости от числа вычислительных ядер (горизонтальная ось – в логарифмическом масштабе)

до 1024000 время увеличилось на 17,5%) [2]. Исследование масштабируемости алгоритма на большое количество ядер проводилось с использованием агентно-ориентированной системы имитационного моделирования (AGNES). Исследование показало, что даже при явном распараллеливании алгоритма прямого статистического моделирования на большое количество ядер не происходит ожидаемого ускорения, близкого к линейному закону. Это связано с тем, что при числе ядер порядка сотен тысяч или нескольких миллионов возникают проблемы с большой загрузкой ядер-”сборщиков”, которые периодически собирают статистику с ядер-”вычислителей”. Следовательно, при масштабировании необходима модификация параллельной вычислительной программы, например, увеличение количества ядер-”сборщиков”. Аналогичные эксперименты проведены с численным моделированием сейсмических полей в 3D неоднородных упругих средах. В качестве метода решения используется сеточный разностный метод, а область моделирования представляется изотропной 3D неоднородной сложно построенной упругой средой. Моделирование показывает, что при решении этой задачи можно использовать 1млн. и более вычислительных ядер, следовательно, можно значительно ускорить время счета прямых задач, необходимых для интерпретации данных вибросейсмического зондирования [2]. Таким образом, проведенные исследования показывают эффективность имитационного моделирования при настройке параметров масштабируемых алгоритмов и исследовании их поведения при реализации на большом количестве вычислительных ядер.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Белов С. Д., Зайцев А. С., Каплин В. И., Король А. А., Сковпень Ю., Сухарев А. М., Адакин А. С., Никульцев В. С., Чубаров Л., Кучин Н. В., Ломакин С. В., Калюжный В. А. Использование виртуализованной суперкомпьютер-

ной инфраструктуры Новосибирского научного центра для обработки данных экспериментов физики высоких энергий. Вычислительные технологии. 2012. Т. 17, № 6. С. 36–46.

- [2] Boris Glinsky, Alexei Rodionov, Mikhail Marchenko, Dmitry Podkorytov, Dmitry Weins. Scaling the Distributed Stochastic Simulation to Exaflop Supercomputers. Proceedings of 2012 IEEE 14th International Conference on High Performance Computing and Communications, p. 1131-1136.
- [3] Глинский Б.М., Родионов А.С., Марченко М.А., Подкорытов Д.И., Винс Д.В. Агентно-ориентированный подход к имитационному моделированию супер-ЭВМ экзафлопсной производительности в приложении к распределенному статистическому моделированию. Вестник ЮУрГУ, 2012. № 18 (277), Вып. 12., с. 93-106.
- [4] М.А. Marchenko. PARMONC - A Software Library for Massively Parallel Stochastic Simulation. LNCS. 2011. V. 6873. P. 302-315.

Блокирование течений в проницаемых пористых средах и многозначные решения

Цыпкин Г.Г.

Институт проблем механики РАН, Москва, Россия;

tsyarkin@ipmnet.ru

Аннотация

На примере течений с фазовыми переходами в геотермальных резервуарах рассмотрен процесс блокирования течения образующейся твердой фазой. Предложена математическая модель инъекции пресной воды в геотермальный резервуар, насыщенный твердой фазой соли и перегретым паром. Показано, что закачка пресной воды может приводить к переносу твердого осадка из одной области в другую, значительно увеличивая его количество за фронтом испарения, что приводит к снижению проницаемости и, соответственно, к уменьшению скорости фильтрации. Получено автомодельное решение задачи. Показано, что при критических значениях две ветви решения сливаются и оно перестает существовать. Несуществование автомодельного решения интерпретируется как заполнение пор выпавшей в осадок солью и прекращение течения в геотермальном резервуаре.

Ключевые слова: геотермальный резервуар, фазовые переходы, двузначные решения, выпадение в осадок.

Благодарности: работа была поддержана программой ОЭММПУ РАН № 13 и НИИ математики СВФУ.

Введение

Процессы в проницаемых пористых средах, в которых происходит выпадение осадка и формирование твердой фазы, представляют большой интерес для различных приложений. Программа численного счета TOUGH2-EWASG использовалась для изучения уменьшения пористости и проницаемости пород в пористых и трещиноватых геотермальных резервуарах [1]. В [2] рассматривалось формирование осадка вокруг добывающей газовой скважины при переносе и испарении соленой воды в месторождении газа, приводящему к заметному снижению дебита. На рис. 1 представлено изображение разреза единичной поры, полученное авторами с помощью электронного микроскопа.

В [3] моделировалось формирование осадка при закачке природного газа в хранилище. Аналогичные процессы, блокирующие движение газа, возникают в пластах при образовании гидратов.

Математическая модель выпадения растворенной примеси в осадок на фронте испарения, образующимся в геотермальном резервуаре, исследовалась аналитиче-

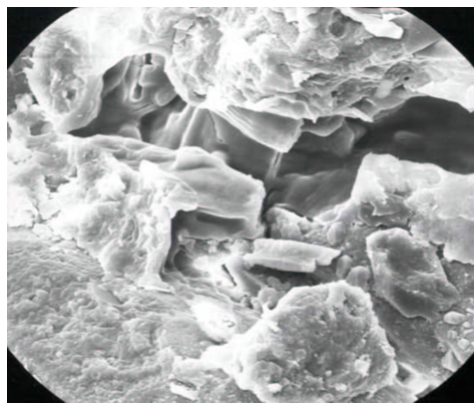


Рис. 1: Изображение разреза поры с кристаллами соли, выпавшей в осадок [2].

ски в работе [4]. Найдено, что существуют две ветви автомодельного решения, а при достижении критического значения параметров ветви сближаются и решение перестает существовать. Было сделано предположение, что коллапс автомодельного решения соответствует такому режиму испарения, когда соль в твердой фазе заполняет поровое пространство и блокирует течение. В [5] использовался пакет программ TOUGH2–EWASG для проверки этой гипотезы и исследования особенностей решения около критической точки, где автомодельное решение перестает существовать. Аналитическое решение в регулярной области с достаточной степенью точности совпадает с численным. В окрестности критической точки различие между решениями становится существенным и численное решение описывает процесс формирования блокирующего осадка, когда насыщенность осадка стремится к единице, а течение прекращается (рис. 2.). В [6] рассматривалась задача о закачке раствора соли в геотермальный резервуар, насыщенный перегретым паром. Показано, что процесс закачки даже слабого раствора может приводить к заполнению пор солью, выпавшей в осадок, и блокированию течения.

Для извлечения тепла из высокотемпературных сухих пород или пород, содержащих перегретый пар, используется технология, основанная на инъекции воды. Этот процесс сопровождается испарением жидкой фазы. Изначально проницаемые породы могут содержать соли в твердой фазе. При инъекции воды соль может растворяться, переноситься в растворе в область пониженного давления и вновь выпадать в осадок при испарении воды из раствора. В этом случае могут образовываться слабопроницаемые или непроницаемые области, что приводит к коллапсу всего течения. Аналогичные течения могут возникать и в природных явлениях, при поступлении пресной воды в геотермальный резервуар, содержащий соль.

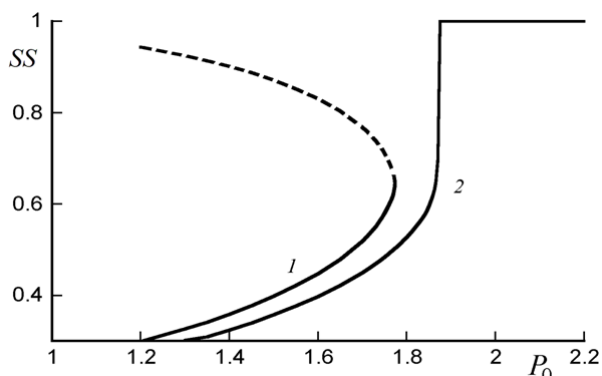


Рис. 2: Бифуркационная диаграмма решения об извлечении пара из геотермального резервуара, насыщенного раствором соли. 1 – аналитическое решение (сплошная линия – устойчивое решение, пунктирная линия – неустойчивое решение), 2 – численное решение.

Формулировка задачи

Рассмотрим однородный геотермальный резервуар с пористостью ϕ , проницаемостью k_0 , температурой T_0 и давлением P_0 . Предположим, что высокотемпературные породы в начальном состоянии содержат соль в твердой фазе, насыщенность которой равна SS_0 и перегретый пар с насыщенностью $1 - SS_0$. Термодинамическое условие существования перегретого пара определяется неравенством $P < G(T, c)$, где G – определяется условием фазового перехода Клаузиуса–Клапейрона, c – концентрация примеси в жидкой фазе.

При поступлении в резервуар пресная вода растворяет соль, образуя насыщенный раствор. В области перед фронтом растворения насыщенный раствор сосуществует с солью в твердой фазе. Движение раствора в область пониженного давления приводит к кипению, образованию пара и выпадению в осадок примеси. В результате формируются три области, разделенные двумя фронтами фазовых переходов. В первой области (1), соответствующей начальному состоянию и расположенной перед фронтом кипения, пар сосуществует с солью в твердой фазе. Вторая область (2) содержит насыщенный раствор и осадок. Область 3, прилегающая к закачивающей скважине, содержит пресную воду и отделена от области насыщенного раствора фронтом растворения. В качестве примера будем рассматривать поваренную соль, которая встречается повсеместно в подземных резервуарах.

При закачке холодной воды в высокотемпературный пласт происходит ее нагрев, но скорость температурного фронта охлаждения значительно ниже скорости жидкости из-за большой теплоемкости пород. Поэтому в высокопроницаемых резервуарах фронт растворения опережает температурный фронт. Охлаждение пород

из-за испарения на переднем фронте составляет несколько градусов, так как теплоемкость проницаемых пород при пористости 10–20 % значительно превосходит теплоемкость жидкой фазы и компенсирует затраты энергии на фазовый переход. Более того, если рассматривать движение в пласте небольшой толщины или движение по трещине, что также описывается аналогичными уравнениями, то поперечный поток тепла от окружающих непроницаемых пород будет способствовать поддержанию постоянной температуры резервуара. В силу сказанного, будем рассматривать задачу в изотермическом приближении. Такой подход позволяет сфокусироваться на основных процессах и не рассматривать процессы, играющие второстепенную роль.

Движение в области 1 описывается уравнением неразрывности, уравнением Дарси и уравнением состояния Клапейрона. Исключая скорость и плотность, получаем уравнение для давления, которое в линейном приближении имеет вид

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \kappa_1 \Delta P, \quad \kappa_1 = \frac{k_0 K(SS_0) P_0}{\phi \mu_v (1 - SS_0)} \quad (1)$$

Здесь $K = (1 - SS)^3$ – относительная фазовая проницаемость, μ_v – вязкость пара.

Аналогично, в областях 2 и 3, содержащих насыщенный раствор и пресную воду, из законов сохранения массы и закона Дарси следуют уравнения для давления

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \kappa \Delta P, \quad \kappa = \frac{k}{\phi \alpha_l \mu_l} \quad (2)$$

Здесь α_l и μ_l – соответствующие сжимаемости и вязкости раствора соли и пресной воды. В области 2 $\mu_l = \mu_2$ и $k = k_0 K(SS)$, а в области 3 $\mu_l = \mu_3$ и $k = k_0$.

Поскольку область 2 содержит раствор, который сосуществует с солью в твердой фазе, то, в состоянии термодинамического равновесия раствор с необходимостью будет насыщенным. Из предположения о состоянии термодинамического равновесия следует, что растворение и выпадение в осадок твердой фазы происходит только на движущихся границах фазовых переходов. Тогда, считая твердую фазу неподвижной, получаем из закона сохранения массы соли

$$\frac{\partial SS}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

Условия на переднем фронте кипения – выпадения в осадок, движущемся со скоростью V_1 , формулируются как законы сохранения массы H_2O и массы соли и имеют вид

$$\begin{aligned} & \frac{k_0 K(SS_*)}{\phi \mu_2} (\text{grad } P)_{n-} - \frac{\rho_{v*}}{\rho_{w2}} \frac{k_0 K(SS_0)}{\phi \mu_v} (\text{grad } P)_{n+} \\ & = \left[\frac{\rho_{v*}}{\rho_{w2}} (1 - SS_0) - (1 - SS_*) \right] V_{1n} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\frac{k_0 K(SS_*)}{\phi \mu_2} (\text{grad} P)_{n-} = \left[\frac{SS_0 \rho_{salt}}{\rho_{sol2} c_{sat}} - \frac{SS_* \rho_{salt}}{\rho_{sol2} c_{sat}} - 1 + SS_* \right] V_{1n} \quad (5)$$

Здесь ρ_{salt} – плотность соли в твердой фазе, а SS_* представляет собой объемную долю соли в твердой фазе за фронтом в области насыщенного раствора и является неизвестной величиной, которая находится в процессе решения задачи.

Обычно, при рассмотрении растворов, считается, что масса воды существенно превосходит массу растворенного вещества. В насыщенном высокотемпературном растворе содержание примеси сравнимо по массе с количеством воды, поэтому в соотношениях (4), (5) и далее используются эффективные плотности воды и соли в растворе, соответственно ρ_{w2} и $\rho_{sol2} c_{sat}$, где ρ_{sol2} – плотность раствора, а c_{sat} – его концентрация насыщения.

Аналогично, законы сохранения на фронте растворения имеют вид

$$\frac{k_0}{\phi \mu_3} (\text{grad} P)_{n-} - \frac{\rho_{w2}}{\rho_{w3}} \frac{k_0 K(SS_*)}{\phi \mu_2} (\text{grad} P)_{n+} = \left[(1 - SS_*) \frac{\rho_{w2}}{\rho_{w3}} - 1 \right] V_{2n} \quad (6)$$

$$\left[\frac{\rho_{salt}}{c_{sat} \rho_{sol2}} SS_* + 1 - SS_* \right] V_{2n} = - \frac{k_0 K(SS_*)}{\phi \mu_2} (\text{grad} P)_{n+} \quad (7)$$

Давление на передней границе, поверхности кипения – выпадения в осадок, может быть определено из соотношения Клапейрона–Клаузиуса, учитывающего наличие растворенной примеси. В изотермическом случае давление кипения на передней границе непосредственно вычисляется по начальной температуре пласта

$$P_1^* = G(T, c) = G(T_0, c_{sat}(T_0)) \equiv G(T_0)$$

По известному давлению на фронте кипения из уравнения Клапейрона вычисляется плотность пара на этой поверхности $\rho_{v*} = P_1^*/RT_0$.

Для простоты используем следующие аппроксимации для кривой Клаузиуса–Клапейрона и для концентрации насыщения как функции температуры

$$P = 10^5 (866.77 - 3.6024 T_0 + 0.0038239 T_0^2), \quad c_{sat} = -0.014836 + 0.0006878 T_0$$

При исследовании задачи о закачке пресной воды в высокотемпературные пористые породы найдено, что поверхность кипения мигрирует медленно по сравнению со скоростью перераспределения давления [6]. Вывод, сделанный на основе оценки характерных параметров в условии на поверхности фазового перехода, был подтвержден численными расчетами. Таким образом, давление в области жидкой фазы за фронтом, в каждый момент времени успевает перераспределиться и течение за фронтом носит квазистационарный характер. Аналогичные оценки справедливы и для рассматриваемой задачи. Отсюда следует, что вода в области 3 и

раствор в области 2 ведут себя как несжимаемые жидкости и можно пренебречь левой частью уравнения (2). В результате распределения давления в этих областях удовлетворяют уравнению

$$\Delta P = 0 \quad (8)$$

Автомодельное решение

Рассмотрим одномерную полубесконечную задачу. Если давление в резервуаре P_0 , давление в закачивающей скважине P^0 и начальное распределение насыщенности соли в твердой фазе SS_0 являются постоянными величинами, то задача допускает автомодельное решение вида

$$P = P(\xi), \quad SS = SS(\xi), \quad \xi = x/\sqrt{t}, \quad X_1(t) = \beta_1\sqrt{t}, \quad X_2(t) = \beta_2\sqrt{t}$$

Из уравнения (3) следует, что в области 2 для автомодельной задачи насыщенность соли в твердой фазе является постоянной величиной $SS = SS_* = \text{const}$.

Распределения давления в трех областях следуют из уравнений (1), (8) и имеют вид

$$\beta_1 < \xi < \infty : P(\xi) = P_0 + (P_1^* - P_0) \frac{\text{erfc}(\xi/2\sqrt{\kappa_1})}{\text{erfc}(\beta_2/2\sqrt{\kappa_1})} \quad (9)$$

$$\beta_2 < \xi < \beta_1 : P(\xi) = \frac{P_2^* - P_1^*}{\beta_2 - \beta_1} \xi + \frac{\beta_2 P_1^* - \beta_1 P_2^*}{\beta_2 - \beta_1} \quad (10)$$

$$0 < \xi < \beta_2 : P(\xi) = P^0 + (P_2^* - P^0) \frac{\xi}{\beta_2} \quad (11)$$

Здесь P_2^* – давление на границе растворения, $\kappa_1 = k P_0 K(SS_0) / \phi \mu_v (1 - SS_0)$.

Подставляя решения (9) – (11) в систему граничных условий (4) – (7) получаем систему трансцендентных уравнений. Вводя безразмерные автомодельные скорости подвижных границ $\gamma_{1,2} = \beta_{1,2} / 2\sqrt{\kappa_2}$ приводим систему к безразмерному виду для определения искомым параметров γ_1 , γ_2 , SS_* и P_2^* / P^0

$$\left[\frac{\rho_{v*}}{\rho_{w2}} (1 - SS_0) - 1 + SS_* \right] \gamma_1 = \frac{K(SS_*)}{2(\gamma_2 - \gamma_1)} \left(\frac{P_2^*}{P^0} - \frac{P_1^*}{P^0} \right) + \frac{P^0}{P_0} \sqrt{\frac{\kappa_1}{\pi \kappa_2}} \frac{\rho_{v*}}{\rho_{w2}} (1 - SS_0) \left(\frac{P_1^*}{P^0} - \frac{P_0}{P^0} \right) \frac{\exp(-\gamma_1^2 \kappa_2 / \kappa_1)}{\text{erfc}(\gamma_1 \sqrt{\kappa_2 / \kappa_1})} \quad (12)$$

$$\left[SS_* \frac{\rho_{salt}}{\rho_{sol2} c_{sat}} + (1 - SS_0) \frac{\rho_{v*}}{\rho_{w2}} - \frac{SS_0 \rho_{salt}}{\rho_{sol2} c_{sat}} \right] \gamma_1 = \frac{P^0}{P_0} \sqrt{\frac{\kappa_1}{\pi \kappa_2}} \frac{\rho_{v*}}{\rho_{w2}} (1 - SS_0) \left(\frac{P_1^*}{P^0} - \frac{P_0}{P^0} \right) \frac{\exp(-\gamma_1^2 \kappa_2 / \kappa_1)}{\text{erfc}(\gamma_1 \sqrt{\kappa_2 / \kappa_1})} \quad (13)$$

$$\left[\frac{\rho_{w3}}{\rho_{w2}} - (1 - SS_*) \right] \gamma_2 = \frac{\rho_{w3} \mu_2}{\rho_{w2} \mu_3} \left(\frac{P_2^*}{P^0} - 1 \right) \frac{1}{2\gamma_2} + \left(\frac{P_2^*}{P^0} - \frac{P_1^*}{P^0} \right) \frac{K(SS_*)}{2(\gamma_2 - \gamma_1)} \quad (14)$$

$$\left[1 + SS_* \left(\frac{\rho_{salt}}{\rho_{sol2} c_{sat}} - 1 \right) \right] \gamma_2 = - \left(\frac{P_2^*}{P^0} - \frac{P_1^*}{P^0} \right) \frac{K(SS_*)}{2(\gamma_2 - \gamma_1)} \quad (15)$$

$$\rho_{w2} = (1 - c_{sat})\rho_{sol2}, \quad \kappa_2 = \frac{k P^0}{\phi \mu_2}$$

Проницаемость k является параметром, но решение задачи от него не зависит. Это свойство было также отмечено для задачи извлечения пара из водонасыщенного геотермального пласта [4] и, надо полагать, является характерным для задач в изотермическом приближении.

При исследовании задач о выпадении солей в осадок при фазовых переходах было найдено, что при критических значениях параметров ветви автомодельного решения сливаются, что соответствует слиянию корней системы трансцендентных уравнений. В этом случае использование метода Ньютона приводит к неудовлетворительным результатам, если корни расположены близко. Наилучшим способом определить момент слияния корней и найти критические параметры, является сведение системы к одному трансцендентному уравнению. Тогда слияние корней можно проследить на простой диаграмме.

После алгебраических преобразований полученная система трансцендентных уравнений сводится к одному уравнению, $F(\gamma_1) = 0$, которое исследовалось численно при характерных значениях параметров.

Результаты численных расчетов

При больших давлениях инъекции кипение подавляется и процесс мало отличается от поршневого вытеснения пара. В этом случае хорошо работает как метод Ньютона (если в качестве начальных данных брать решение поршневой задачи), так и метод половинного деления.

Численные эксперименты показали, что при больших давлениях инъекции и больших начальных значений SS_0 насыщенности соли в твердой фазе передний фронт испарения движется значительно быстрее фронта растворения, а количество соли в твердой фазе в области между фронтами отличается незначительно от начального значения. Так, при $\phi = 0.1$, $T_0 = 570$ К, $P_0 = 1$ МПа, $SS_0 = 0.3$, $P^0 = 10$ МПа получаем $\gamma_1 = 0.333$, $\gamma_2 = 0.115$ и $SS_* = 0.334$.

При снижении давления инъекции и меньших значений SS_0 протяженность области между фронтами уменьшается. Например, при $SS_0 = 0.1$ и $P^0 = 6$ МПа вычисления дают: $\gamma_1 = 0.169$, $\gamma_2 = 0.122$ и $SS_0 = 0.214$. В этом случае уменьшение давления интенсифицирует кипение и значительная часть воды переходит в пар, замедляя движения переднего фронта. Кроме того, интенсификация испарения приводит к выпадению в осадок большего количества растворенной примеси. Поэтому в первом примере содержание соли в твердой фазе при переходе через фронт кипения увеличилось незначительно – на 11 %, а во втором случае – возросло более чем в два раза. Отсюда можно сделать вывод, что заполнение пор выпавшей в осадок примесью и блокирование течения следует ожидать при небольших значениях давления инъекции, соответствующих интенсивному процессу кипения раствора.

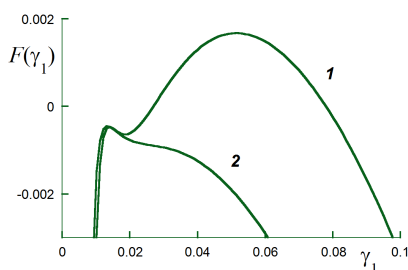


Рис. 3: Характерный вид трансцендентных кривых, иллюстрирующий исчезновение решения автомодельной задачи при слиянии корней: $\phi = 0.1$, $T = 570$ К, $P_0 = 1$ МПа, $SS_0 = 0.3$; 1 – $P^0 = 5.9$ МПа, 2 – $P^0 = 5.7$ МПа.

Основываясь на полученных выше результатах, исследуем характер процесса, уменьшая давление инъекции. На рис. 3 представлен характерный вид трансцендентной кривой $F(\gamma_1)$ при различных давлениях инъекции. Проведенные расчеты показывают, что уравнение $F(\gamma_1) = 0$ имеет 2 корня и автомодельное решение является двузначным (кривая 1). При больших значениях давления инъекции корни находятся на значительном расстоянии друг от друга. Уменьшение давления сопровождается сближением корней и приводит к исчезновению решения, когда вся трансцендентная кривая располагается ниже оси абсцисс (кривая 2).

Проанализируем поведение корней при изменении параметров задачи. На фиг. 4 представлена бифуркационная диаграмма, отражающая процесс слияния корней и исчезновения решения автомодельной задачи. Возникает вопрос о выборе решения, которое соответствует реальному процессу. Значение большего корня SS_* (кривая 1) уменьшается с давлением инъекции, а значение меньшего (кривая 2) возрастает. С физической точки зрения критическому моменту заполнения пор солью, выпавшей в осадок, должен предшествовать рост количества соли в твердой фазе при монотонном изменении параметра. Поэтому физический смысл имеет

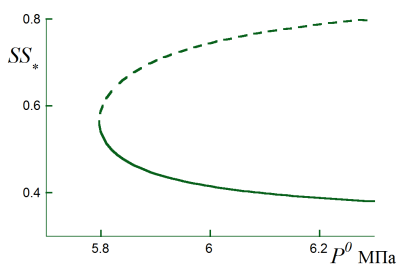


Рис. 4: Распределения насыщенности соли в твердой фазе как функции давления инъекции при аналогичных фиг. 1 параметрах: 1 – неустойчивое решение; 2 – решение, имеющее физический смысл.

меньший корень. Приведенные рассуждения соответствуют результатам прямого численного моделирования выпадения солей в осадок в задаче извлечения пара из пласта, насыщенного раствором соли [5].

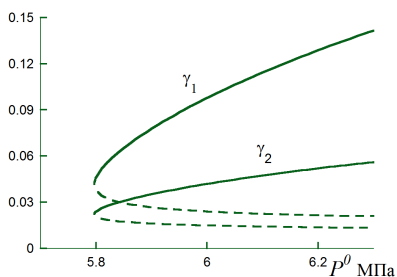


Рис. 5: Распределения автомодельных скоростей движения фронта испарения – выпадения в осадок и фронта растворения как функции давления инъекции при аналогичных рис. 3 параметрах: Сплошные линии – решения, имеющие физический смысл.

На фиг. 5 представлены зависимости значений автомодельных скоростей от давления инъекции. Здесь физический смысл имеют ветви решения, убывающие при уменьшении давления инъекции (сплошные линии). В случаях, представленных на диаграммах, критическое значение давления равно $P^0 = 5.796$ МПа, в то время как давление кипения $P_f = 5.579$ МПа, т.е. отличие от давления насыщения составляет немногим более двух атмосфер. Это означает, что образование областей, насыщенных осадком, может происходить либо в начальный период инъекции, либо при прекращении закачивания, когда давление инъекции мало. Расчеты показывают, что уменьшение начального давления или повышение температуры резервуара также приводит к интенсификации испарения и более медленному дви-

жению переднего фронта, что способствует росту соли в твердой фазе за фронтом испарения.

В естественных условиях пополнение ресурсов геотермального резервуара происходит, главным образом, за счет поступления пресных вод с поверхности, когда градиенты давления невелики. Если породы содержат соль в твердой фазе, то процесс растворения соли и дальнейшее движение раствора вниз, в область более высоких температур, может приводить к образованию непроницаемых областей, насыщенных осадком. Расчеты, приведенные в настоящей работе показывают, что образование солевых пробок, возникающих как в природных процессах, так и при техногенном воздействии на резервуар, следует ожидать в высокотемпературных системах с малым начальным давлением перегретого пара при давлении инъекции, близким к давлению кипения, а наиболее важной характеристикой, ответственной за образование непроницаемых солевых пробок, является интенсивность кипения раствора.

Выводы

Предложена математическая модель инъекции пресной воды в геотермальный резервуар, насыщенный перегретым паром и солью в твердой фазе. Пресная вода, двигаясь через область твердой фазы соли, растворяет ее и переносит в направлении течения. При достижении области низкого давления формируется фронт испарения, на котором соль выпадает в осадок. Естественно предположить, что область несуществования решения соответствует режимам инъекции, когда течение через проницаемые породы блокируется выпавшей в осадок солью, заполняющей поровое пространство на фронте испарения. Численные эксперименты показали, что критический режим для случая полубесконечного пласта наступает при давлении инъекции близким к давлению насыщения, при приводит к интенсивному испарению жидкой фазы. В задаче извлечения пара из геотермального резервуара, насыщенного водой, содержащей растворенную примесь, наблюдается обратный эффект. Падение давления в добывающей скважине интенсифицирует испарение, но существенно возрастает скорость фронта кипения и количество выпавшей в осадок соли на единицу объема уменьшается.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Battistelli A., Calore C., Pruess K. The simulator TOUGH2/EWASG for modeling geothermal reservoirs with brines and noncondensable gas // *Geothermics*. 1997. V. 26. P. 437-464.
- [2] Kleinitz W., Koehler M., Dietzsch G. The precipitation of salt in gas producing well // *SPE Europ. Formation Damage Conf. Netherlands*, 2001. Paper SPE 68953-MS.

- [3] Lorentz S., Muller W. Modeling of halite formation in natural gas storage aquifers // Proc. TOUGH2 Symp. Berkeley, California, 2003.
- [4] Tsyarkin G.G., Woods A.W. Precipitate formation in a porous rock through evaporation of saline water // J. Fluid Mech. 2005. V. 537. P. 35-53.
- [5] Tsyarkin G.G., Calore C. Investigation of salt precipitation in geothermal reservoir near a sealing point // Proc. 36th Workshop on Geothermal Reservoir Eng. Stanford, 2007.
- [6] Цыркин Г.Г. Инжекция раствора соли в геотермальный резервуар, насыщенный перегретым паром // Изв. РАН. МЖГ. 2008. № 5. С. 120-132.

Дифференциальная механика жидкостей: согласованные аналитические, численные и лабораторные модели стратифицированных течений

Чашечкин Ю.Д.¹, Загуменный Я.В.²

¹*ИПМех РАН, Москва, Россия;*

chakin@ipmnet.ru

²*ИГМ НАНУ, Киев, Украина;*

zagumennyi@gmail.com

Аннотация

Развивается геометрическая форма описания течений жидкостей, дополняющая традиционные подходы и обеспечивающая выполнение единых требований в различных методах исследований – аналитических, численных и экспериментальных. В качестве математической основы выбраны дифференциальные формы законов сохранения вещества, состава, импульса и полной энергии, дополненные уравнениями состояния. Параметры кодов и методика эксперимента обеспечивают разрешение и визуализацию всех компонент течений – и крупно- и мелкомасштабных, определяемых условием совместности уравнений и вытекающим критерием полноты описания. Характерные масштабы компонент течений определяются базовыми уравнениями и граничными условиями. В полной мере подход реализован в задаче расчета двумерных течений, индуцированных диффузией на топографии. Необходимость использования суперкомпьютерных технологий обусловлена внутренней многомасштабностью задачи. Проведенные расчеты установления течений на пластине и равнобедренном клине в деталях согласуются с известными аналитическими решениями и данными лабораторных экспериментов. Приводится пример наблюдения такого течения в атмосфере.

Ключевые слова: фундаментальная система, динамика и структура, стратификация, многомасштабность, расчет, эксперимент.

Благодарности: исследование проводилось при поддержке РФФИ (проекты 12-01-00128-а и 12-05-90417-Укр а).

Введение

Развитие техники оптической визуализации, создание новых оптических инструментов наземного и космического базирования открыло новые возможности в изучении природных систем в широком диапазоне масштабов – от световых лет в космосе до микронов в лаборатории. Новые высокоразрешающие инструменты позволили установить сам факт существования тонкой структуры сплошной среды, зарегистрировать пространственно упорядоченные формы, определить характерные

масштабы, которые разделяются на несколько групп. Упорядоченные структуры наибольших масштабов – в несколько световых лет – высвечиваются вспыхивающими звездами в межзвездной среде.

В лабораторных условиях тонкая структура с масштабами от сантиметров до микрон регистрируется во многих видах течений неоднородных сред – волновых, вихревых, при высыхании суспензий наночастиц [1]. В атмосфере и гидросфере Земли поперечные масштабы высокоградиентных границ отдельных элементов структур лежат в диапазоне от сантиметров до сотен метров. В качестве примера структуризации течения в атмосфере на рис.1 приводится фотография на первый взгляд парадоксальной картины промышленных выбросов в Южно-Сахалинске.



Рис. 1: Индустриальные выбросы в атмосферу (Южно-Сахалинск, 19 сентября 2011 г., фото Ю.Д. Чашечкина)

В предрассветные часы пар и дым из трубы ТЭЦ переносится направо в форме типичной турбулентной струи. Струи пара из градирен слева от трубы поднимаются вертикально и несколько сближаются с высотой. Однако облачко пара располагается не над струями, а смещено влево. Темный дым из трубы котельной сносится налево, причем довольно быстро клубы трансформируются в полосчатые структуры, вытянутые по ветру с неоднородно распределенной концентрацией дыма.

Общая структура изображения типична для стратифицированных течений, в которых силы плавучести подавляют вертикальное движение и на больших (поворот струй из вертикальных в горизонтальные) и на малых масштабах (линеаризация течения). Направления струй свидетельствуют о действии восходящих вдоль-склоновых течений и компенсационного течения в центре долины, ориентированного вертикально вниз. Течения, индуцированные диффузией на топографии активно изучаются последние шестьдесят лет и в атмосфере [2] и в океане [3]. Расчет такого течения на простой топографии (пластина конечной длины, клин) выбран в качестве примера реализации цели данной работы, ориентированной на разработку математической модели, позволяющей рассчитывать и динамику, и тонкую структуру реальных течений.

Фундаментальная система уравнений

В качестве математической основы моделирования течений в окружающей среде выбрана фундаментальной система уравнений механики неоднородных жидкостей, выражающая в дифференциальной форме законы сохранения вещества, состава, импульса, и полной энергии [4]. Система замыкается алгебраическим (эмпирическим) уравнением состояния, связывающим термодинамическими функциями изучаемой среды. В отличие от конститутивных (теории турбулентности) и приближенных моделей симметрии такой системы соответствуют основным принципам физики [5]. Система анализируется с учетом условия совместности составляющих уравнений, определяющим ранг полного набора уравнений, порядок линеаризованной версии и степень характеристического (алгебраического) уравнения. В слабо диссипативных средах (атмосфере и гидросфере) анализ общих свойств линейной модели показал, что течения описываются набором функций, характеризующихся различными собственными масштабами. Крупномасштабные функции определяют динамику процессов, мелкомасштабные – тонкую структуру течений [6].

Рассматривается задача формирования течений несжимаемой линейно стратифицированной жидкости, невозмущенное распределение плотности $\rho_0(z)$ которая задается профилем солёности $S_0(z)$, где ось $0z$ направлена вертикально вверх, $\Lambda = (d \ln \rho_0 / dz)^{-1}$ – масштаб, $N = 2\pi / T_b = \sqrt{g/\Lambda}$ – частота и T_b – период плавуности, g – ускорение свободного падения. Фундаментальная система включает в себя уравнения состояния $\rho(S(z))$, неразрывности, Навье-Стокса в приближении Буссинеска, диффузии стратифицирующей компоненты и визуализирующей примеси [4]

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_{00} (\exp(-z/\Lambda) + s + s_0), \quad \text{div } v = 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + (v \nabla) v &= -\frac{1}{\rho_{00}} \nabla P + \nu \Delta v - (s + s_0) g, \\ \frac{\partial s}{\partial t} + v \cdot \nabla s &= \kappa_S \Delta s + \frac{v_z}{\Lambda}, \quad \frac{\partial s_0}{\partial t} + v \cdot \nabla s_0 = \kappa_{S_0} \Delta s_0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь s – возмущение солёности (стратифицирующего компонента), включающее коэффициент солевого сжатия, s_0 – концентрация визуализирующей примеси, $v = (v_x, v_y, v_z)$ – индуцированная скорость, P – давление за вычетом гидростатического, ν , κ_S и κ_{S_0} – коэффициенты кинематической вязкости, диффузии соли и визуализирующей примеси, соответственно, t – время, ∇ и Δ – операторы Гамильтона и Лапласа.

Физически обоснованные начальные условия и граничные условия задачи (прилипания для скорости и непротекания для вещества и затухания всех возмущений на бесконечности) имеют вид

$$v, s|_{t \leq 0} = 0, \quad v_x|_{\Sigma} = v_z|_{\Sigma} = 0, \quad \left[\frac{\partial S}{\partial n} \right]_{\Sigma} = \left[\frac{\partial s}{\partial n} \right]_{\Sigma} - \frac{1}{\Lambda} \frac{\partial z}{\partial n} = 0, \quad (2)$$

$$[s_0]|_{\Sigma_0} = c_0, \quad v, s, s_0|_{x, z \rightarrow \infty} = 0$$

где n – внешняя нормаль к поверхности препятствия Σ .

Система (1) с начальными и граничными условиями (2) содержит большое число собственных масштабов: длины (плавучести Λ , размеров пластины L , скоростного $\delta_N^\nu = \sqrt{\nu/N}$ и диффузионного $\delta_N^{\kappa_S} = \sqrt{\kappa_S/N}$ универсальных микромасштабов); скорости ($U_N^\nu = \sqrt{\nu N}$, $U_N^{\kappa_S} = \sqrt{\kappa_S N}$) и времени $t = T_b$, характеризующих различные функции полного решения¹). Существенные различия в значениях масштабов длины указывают на сложность внутренней структуры даже такого медленного течения, которое порождается малыми силами плавучести, возникающими вследствие неоднородности молекулярного потока стратифицирующего компонента.

Отношения масштабов задают традиционные безразмерные комплексы – шкалу плавучести $C = \Lambda/L$, числа Рейнольдса с текущим значением скорости $Re = |v|L/\nu$ (или с характерным внутренним масштабом задачи $Re_N = L/\delta_N^\nu = \sqrt{NL^2/\nu}$), Пекле $Pe = |v|L/\kappa_S$ ($Pe_N = L/\delta_N^{\kappa_S} = U_N^{\kappa_S}L/\kappa_S = \sqrt{NL^2/\kappa_S}$), Шмидта $Sc = \nu/\kappa_S$ (здесь числа Фруда и Рейнольдса связаны соотношением $Fr = U_N^\nu/NL = \delta_N^\nu/L = 1/Re_N$).

Условия адекватного разрешения мелкомасштабных элементов течения, обусловленных совместным действием эффектов стратификации и диффузии, накладывает существенные ограничения на минимальный шаг по пространству, что существенно замедляет скорость численных расчетов и вынуждает прибегать к помощи высокопроизводительных вычислительных систем.

Линейная версия системы (1) имеет восьмой порядок и, с учетом затухания всех возмущений на бесконечности, ее полное решение включает четыре независимых разномасштабных функции [6].

Численные алгоритмы построения решения

Алгоритмы решения строятся на основе двух методов – конечных разностей и конечных объемов.

При реализации **конечно-разностного подхода** численное решение системы (1) – (2) находится в естественных физических переменных скорость-давление на разностном шаблоне с разнесенной структурой расположения сеточных узлов. Рассчитываемые величины давление определяются в разных узлах прямоугольной сетки и двух вспомогательных полусеток. В узлах основной сетки располагались сеточные функции давления и солёности, а на серединах граней контрольных объемов, т.е. в узлах вспомогательных полуцелых сеток, сеточные функции компонент скорости, соответственно. Шаги сеток выбирались как равномерными, так и переменными в обоих направлениях. Для нахождения значений параметров в точках,

не соответствующих их положению на разностном шаблоне, использовалась линейная интерполяция.

Количество точек в каждом из направлений, менялось в диапазоне 500div2000 и 50div300, соответственно. Рассчитанные картины течения оставались устойчивыми при изменении числа узлов разностной сетки во всем указанном диапазоне.

Процедура определения неизвестных была организована в виде трехэтапной схемы расщепления по физическим параметрам с использованием их известных значений с предыдущего временного слоя. Конечно-разностные аппроксимации рассматриваемых уравнений строились по неявной схеме на пятиточечном шаблоне в соответствии с известной схемой «крест». Слагаемые с градиентом давления вычислялись с помощью односторонних разностей. Для аппроксимации диффузионных членов уравнений использовалась схема с центральными разностями, а конвективные члены аппроксимировались схемой с разностями против потока.

Полученная система конечно-разностных уравнений аппроксимировала анализируемую систему дифференциальных уравнений (1) с первым порядком точности по времени и со вторым порядком точности по пространственным переменным. Проведенный анализ показал устойчивость схемы.

Решение полученной системы разностных алгебраических уравнений с пятидиагональной матрицей коэффициентов осуществлялось методом «переменных направлений», переводящим исходное уравнения для давления в два одномерных уравнения второго порядка с трехдиагональными матрицами, которые рассчитывались методом прогонки.

При проведении вычислений разностная сетка сгущалась в областях течения с большими градиентами (вблизи поверхности пластины и ее кромок), так чтобы на масштабе солености $\delta_N^{k,S}$ помещалось наперед заданное число разностных ячеек, которое в расчетах принималось не меньше пяти. Более подробно методика изложена в [7].

Для численной реализации **метода конечного объема** был разработан собственный решатель stratifiedFlow на основе стандартного солвера icoFoam, реализующего численное решение нестационарных уравнений Навье-Стокса для однородной вязкой несжимаемой жидкости в пакете OpenFOAM с открытым исходным кодом на языке C++. Для расчета течений непрерывно стратифицированных жидкостей в него были введены дополнительные уравнений для расчета переменной плотности, концентрации стратифицирующего компонента и визуализирующей примеси, а также новые параметры – частота плавучести, масштаб стратификации, коэффициент диффузии, ускорение свободного падения и другие, обеспечивающие включение эффектов нелинейности, стратификации и диффузии. Решатель был дополнен программными фрагментами расчета других информативных физических величин – полной плотности, функции тока, динамической завихренности $\omega = rotv$, темпа бароклиной генерации завихренности $\dot{\Omega} = \nabla P \times \nabla \rho^{-1}$, компонент тензора вязких напряжений, скорости диссипации механической энергии, распределения сил и моментов, воздействующих на обтекаемое препятствие.

При численной реализации граничных условий были использованы стандартные и расширенные утилиты пакета OpenFOAM, такие как `setFields`, `topoSets` (с дополнительным использованием расширенных библиотек `swakSourceFields` и `swakTopoSources`), `swak4Foam`, `groovyBC`, `funkySetFields`, `funkySetBoundaryField`, которые позволяют задавать аналитические выражения для различных физических переменных с использованием программы GNU bison, предназначенной для автоматического создания синтаксических анализаторов по данному описанию грамматики.

В качестве расчетной области был выбран квадрат со стороной, на порядок превышающий характерный размер препятствия, помещенного в ее центр. При расчете течений на внешних границах расчетной области ставились “мягкие” граничные условия типа линейной экстраполяции, соответствующие равенству нулю нормального градиента всех рассчитываемых физических переменных. Построение расчетной сетки осуществлялось как на основе стандартных утилит `blockMesh`, `snappyHexMesh`, так и с использованием независимого сеточного генератора Salome. Процедура построения структурированных расчетных сеток с помощью утилиты `blockMesh` была автоматизирована благодаря применению макропроцессора m4, что позволило существенно сократить время перестраивания сетки при изменении геометрических параметров расчетной области и вида препятствия. С целью адекватного разрешения структуры течения на диффузионных микромасштабах вблизи непроницаемых границ препятствий и областей, в которых выражены тонкоструктурные вихревые компоненты течений, дополнительно использовались стандартные утилиты `topoSet` и `refineMesh`, позволяющие на основе геометрических либо параметрических признаков выделять подобласти расчетной сетки и измельчать их в соответствии с заданными масштабами и выбранными направлениями.

Для вычисления объемных интегралов по контрольному объему использовалась общая процедура Гаусса, согласно которой интеграл по объему представляется через интеграл по поверхности ячейки, а значение функции на поверхности ячейки интерполируется из значений функции в центроидах соседних ячеек. Для интерполяции конвективных членов использовалась TVD схема (`limitedLinearV`), соответствующая обобщенной кусочно-линейной схеме Чакраварти-Ошера. На ортогональных участках сетки нормальные градиенты скорости на поверхности ячейки, необходимые при вычислении диффузионных членов по теореме Гаусса, находились из значений скорости в центроидах соседних ячеек по схеме второго порядка. На неортогональных участках использовалась итерационная процедура коррекции погрешности, вызванной неортогональностью сетки. Для дискретизации производной по времени использовалась неявная трехточечная несимметричная схема второго порядка с разностями назад (`backward differencing`).

Для связанного расчета поля скорости и давления использовалась предложенная Исса процедура PISO (`pressure implicit with splitting of operators`) с числом корректоров 4. Для решения полученной системы линейных алгебраических уравне-

ний применялись итерационные солверы PCG и PBiCG, использующие методы сопряженных и бисопряженных градиентов с предобуславливанием для симметричных и асимметричных матриц соответственно.

Расчеты поставленных задач проводились в параллельном режиме с применением метода декомпозиции расчетной области на базе суперкомпьютерных комплексов «Ломоносов» и «Чебышев» НИВЦ МГУ, вычислительного кластера МСЦ РАН в рамках технологической платформы UniHUB. С целью оценки эффективности распараллеливания были проведены расчеты двумерной задачи формирования течения, индуцированного диффузией на неподвижной наклонной пластине, с общим количеством расчетных ячеек 2500000.

Процесс установления течения начинается в нулевой момент времени, когда пластина мгновенно прерывает поток стратифицирующего компонента. Критерием окончания счета служит условие малости максимальной относительной разности между значениями искомых переменных на последовательных временных шагах по сравнению с заданной величиной ошибки. На протяжении всего расчета контролировалось выполнение уравнения неразрывности во всех узлах рассматриваемой расчетной области.

Результаты расчетов

В качестве результатов расчетов, проведенных на основе описанных алгоритмов, иллюстрируются картины течений, индуцированных диффузией на непроницаемой пластине, симметричном клине, горизонтальном диске и круговом цилиндре. Такие течения формируются в результате прерывания молекулярного потока стратифицирующего компонента на непроницаемой границе и, как следствие, образования дефицита (избытка) плотности над (под) неподвижным препятствием, погруженным в непрерывно стратифицированную жидкость.

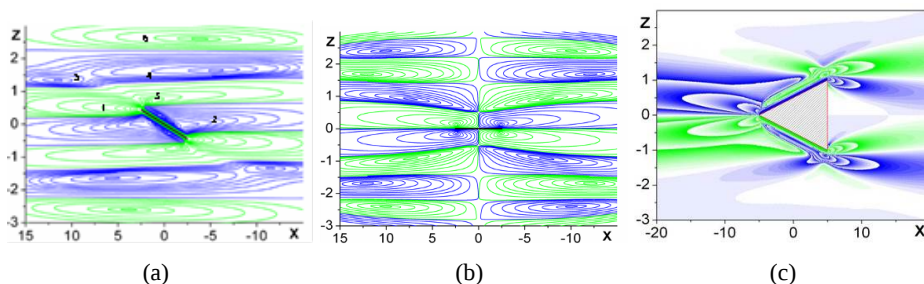


Рис. 2: Картины линий тока течений, индуцированных прерыванием диффузионного потока на пластине (а) – наклонная, (b) – горизонтальная) и клине – (с)

Разработанный алгоритм работает во всех диапазонах параметров задачи, соот-

ветствующим течениям в лаборатории, атмосфере и гидросфере, в частности при нулевых углах наклона прерывающей поверхности к горизонту, когда нарушаются условия существования решения [2] и больших временах, когда не применимы асимптотические рассмотрения [7, 8]. В рассчитанной картине линий тока представлены регулярные ячейки (1 – 6 на рис. 2, а), разделенные тонкими прослойками (положительное направление ращения обозначено зеленым цветом). Над горизонтальной полосой ячейки разных знаков расположены оппозитно относительно главных плоскостей (рис. 2, б). Около угловых точек клина формируются дополнительные тонкоструктурные компоненты (рис. 2, с).

Еще более отчетливо тонкая структура течения выражена в полях динамической завихренности $\Omega = \text{rot} v = (0, \Omega, 0)$ (рис. 3, а) и темпа бароклиной генерации завихренности в пересекающихся полях градиентов давления и плотности $\dot{\Omega} = (0, \dot{\Omega}, 0)$ (рис. 3, б). Появление новых компонентов в окрестности краев пластины обусловлено совместным действием эффектов плавучести, ограничивающих высоту подъема сходящихся струек, и вязкости. Появление «розеток» – системы изолиний, сходящихся в физическую точку – типично для картин диссипативно-гравитационных волн (или волн «нулевой частоты» [9]).

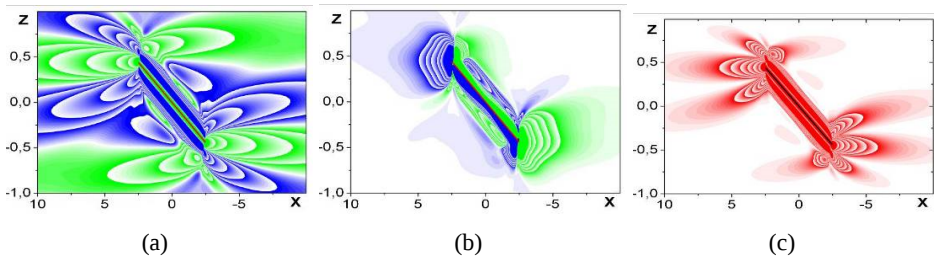


Рис. 3: Поле динамической завихренности Ω – (а), темпа бароклиной генерации завихренности $\dot{\Omega}$ – (б) и скорости диссипации энергии течения ε – (с) в Тид на наклонной пластине $N = 1.256 \text{ A}^{-1}$, $L = 5 \text{ A} <$, $\phi = 10^\circ$ (разные масштабы по осям).

Пересечения изопикн и изобар приводят к порождению дополнительной завихренности и в непосредственной окрестности, и на некотором удалении от препятствия (рис. 3, б). Сложная картина скорости диссипации механической энергии (рис. 3, с) существенно отличается от гладкого поля линий тока. Более подробно методика построения численных решений и результаты анализа их свойств приведены в [10, 11].

Сравнения результатов расчетов и опытов

Рассчитанные поля возмущений градиента плотности для течений, индуцированных диффузией на горизонтальной или наклонной пластине и клине, в которых проявляются и крупномасштабные компоненты, размер которых задается размером препятствия пластины, и тонкие прослойки с масштабами $\delta_N^v = \sqrt{\nu/\bar{N}}$ и $\delta_N^{\kappa_S} = \sqrt{\kappa_S/\bar{N}}$, на больших временах согласуются с картинами визуализации («цветной теневой метод» с горизонтальной щелью и решеткой) распределения градиента коэффициента преломления около пластины в лабораторном бассейне (рис 3, *a, b*).

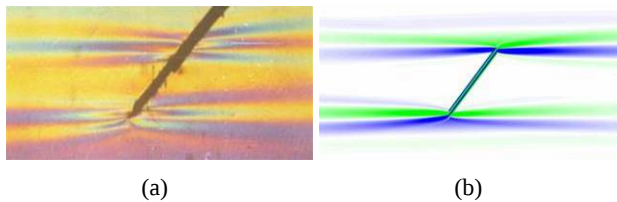


Рис. 4: Теневая и численная визуализация течения, индуцированного диффузией на неподвижной наклонной пластине ($L = 5 \text{ A} <, N = 0.84 \text{ A}^{-1}, T_b = 7.5 \text{ A}, \phi = 40^\circ$)

В изображениях выделяются протяженные полосчатые структуры, примыкающие непосредственно к экстремальным точкам препятствий. Длина полосок растет с повышением чувствительности метода регистрации. Течения, индуцированные диффузией, приводят к самодвижению препятствий нейтральной плавучести в стратифицированной среде при произвольной геометрии препятствия и его ориентации в пространстве, и отсутствуют в однородной жидкости. Расчеты скоростей, сил и моментов, действующих на клин, согласуются с данными непосредственных измерений скоростей самодвижения препятствия в лабораторном бассейне [12]. Детальные расчеты профилей скоростей в середине пластины при углах наклона больше 7° согласуются с формулами Прандтля [2], однако масштаб концентрационного слоя и здесь имеет меньшее значение. Общая картина течения во впадине (двойной вихрь и погружающимся течением в центре и расходящимися вдоль склонов долины рукавами [8]) сохраняется и в случае масштабов реальных атмосферных процессов, приведенных на рис.1. Как показывают расчеты [13], течения, индуцированные диффузией, сохраняются при учете эффектов вращения и служат одним из механизмов переноса вещества и в толще атмосферы, и в глубоком океане.

Заключение

Разработаны оригинальные алгоритмы высокоразрешающего расчета течений непрерывно стратифицированной жидкости, индуцированных диффузией на непроницаемых препятствиях методами конечных разностей и конечного объема с использованием высокопроизводительных суперкомпьютерных систем.

Расчеты многомасштабных структур течений, индуцированных диффузией на неподвижных непроницаемых препятствиях различной формы, согласуются между собой и с данными независимо выполненных экспериментов.

Опробованные методики и результаты расчетов служат основой последующих расчетов обтекания препятствий неоднородными жидкостями и газами.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Чашечкин Ю.Д., Бардаков Р.Н., Шабалин В.В. Регулярная тонкая структура течений в высыхающей капле суспензии наночастиц кварца // Доклады АН. 2011. Т. 436. № 3. С. 338-338.
- [2] Прандтль Л. Гидроаэромеханика. М.: Изд-во иностр. лит., 1949, 520 с.
- [3] Phillips O.M. On flows induced by diffusion in a stably stratified fluid // Deep-Sea Res. 1970. V. 17. P. 435-443.
- [4] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. М.: Наука. 1986. 736 с.
- [5] Байдулов В.Г., Чашечкин Ю.Д. Сравнительный анализ симметрий моделей механики неоднородных жидкостей // Доклады Академии наук. 2012. том 444. № 1. С. 38-41.
- [6] Чашечкин Ю.Д. Иерархия моделей классической механики неоднородных жидкостей // Морской гидрофизический журнал. 2010. № 5. С. 3-10.
- [7] Linden P.F., Weber J.E. The formation of layers in a double-diffusive system with a sloping boundary // J. Fluid Mech. 1977. V. 81. P. 757-773
- [8] Кистович А.В., Чашечкин Ю.Д. Индуцированные диффузией нестационарные пограничные течения в клиновидной впадине // Прикл. Мат. и мех. 1998. Т. 62. Вып. 5. С. 803 - 809.
- [9] Кистович А.В., Чашечкин Ю.Д. Генерация диссипативно- гравитационных волн при тепловой конвекции в стратифицированной среде // ПМТФ 1991. № 3. С. 49-55.

-
- [10] Загуменный Я.В., Чашечкин Ю.Д. Расчет течений непрерывно стратифицированной жидкости с использованием открытых вычислительных пакетов на базе технологической платформы UniHUB // Труды Института системного программирования РАН. 2013. Т. 24. С. 87-106.
- [11] Загуменный Я.В., Чашечкин Ю.Д. Тонкая структура нестационарного течения, индуцированного диффузией на неподвижной пластине // Известия РАН: Мех. жидкости и газа. 2013. № 3. С. 100–117.
- [12] Allshouse M.R., Barad M.F., Peacock T. Propulsion generated by diffusion-driven flow // Nature Physics. 2010. No. 6. P. 516–519.
- [13] Garrett C., MacCready P., Rhines P. Boundary mixing and arrested Ekman layers: rotating stratified flow near a sloping boundary // Annual Review of Fluid Mechanics. 1993. V. 25. P.291-323.

Плоская динамическая задача термомеханических равновесий

Эверстов В.В.¹, Мордовской С.Д.¹

¹*Северо-Восточный федеральный университет, Якутск, Россия;*

vovanevv@mail.ru

msd@mail.ru

Аннотация

В данной работе рассматривается задача определения начального состояния среды для решения двумерной задачи термомеханики. Авторы предлагают алгоритм решения поставленной задачи и предлагают ознакомиться с основными результатами, полученными в ходе реализации поставленной математической модели

Ключевые слова: тепломассоперенос в многолетнемерзлых грунтах, механические свойства мерзлых грунтов, термомеханика многолетнемерзлых грунтов.

Введение

В основу рассматриваемой двумерной модели фазовых переходов в мерзлом грунте положена гипотеза уравнивания внутрипорового давления незамерзшей воды напряжениями, возникающими в твердых фазах грунта [1]. В такой модели механическое состояние среды соответствует предельному, а эффективные напряжения в твердых фазах соответствуют пределам упругости. При этом развитие неупругих деформаций сдерживается тем, что количество льда-цемента возникающего при фазовом превращении воды обеспечивает поддержание условий предельных напряжений. Это соответствует модели упрочняющегося мерзлого грунта. Более детально математическую модель описанной задачи вы можете посмотреть в работе [4].

Для реализации этой модели необходимо, во-первых, решить задачу определения начального состояния среды, т.к. нельзя просто присвоить какое-то одно значение для компонент тензора напряжений.

Постановка задачи начального состояния

Как гипотезу о предельных состояниях среды используем подход Кулона-Мора с линейной огибающей. Также примем аддитивную модель эффективных (твердофазных) напряжений, которая предполагает простое суммирование «парциаль-

ных» значений напряжений по всем твердым фазам.

$$\sigma_c = (1 - m) \sigma_{c,sc} + m (1 - \beta_i) \sigma_{c,i} \quad (1)$$

$$\sigma_p = (1 - m) \sigma_{p,sc} + m (1 - \beta_i) \sigma_{p,i} \quad (2)$$

где $\sigma_{c,sc}$ – предел прочности на сжатие скелета среды, $\sigma_{c,i}$ – предел прочности на сжатие льда $\sigma_{p,sc}$ – предел прочности на растяжение скелета, $\sigma_{p,i}$ – предел прочности на растяжение льда.

Так как предполагается изменение фазового состава среды, каждому отдельно-му состоянию среды соответствует своя конфигурация кругов Мора, которая определяется величиной льдонасыщенности текущего состояния:

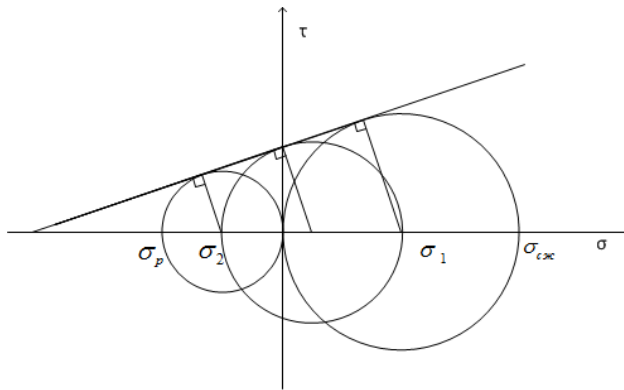


Рис. 1: Круги Мора

При таких допущениях механическое состояние среды графически задается предельными кругами соответствующими пределам на одноосное растяжение и сжатие, σ_p и σ_c соответственно, касающимися в точке начала координат и с центром на оси $O\sigma$. Средний круг, касающийся линейной огибающей, соответствует предельному состоянию и отражает текущее состояние напряженно деформированной среды.

Рассмотрим задачу определения термомеханического состояния мерзлого грунта для прямоугольной области $D: ([1 \dots M] \times [1 \dots L])$, в пределах которого задано распределение начальной температуры. Такая задача является задачей задания начальных условий для модели тепломассопереноса.

Начальная температура задается обеспечивающей двухфазное состояние грунта:

$$T(x, y) = T_0(x, y) \quad (3)$$

Поровое давление задается условиями равновесного состояния:

$$P(x, y) = f(T(x, y)) \quad (4)$$

Уравнения напряженно деформированного состояния записываются в эффективных напряжениях для твердых фаз грунта и включают в правой части распределенные силы, соответствующие силе тяжести и распирающему действию порового давления:

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = m\beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} = m\beta_w \frac{\partial P}{\partial y} + \rho^* g \end{cases} \quad (5)$$

где σ_x , σ_y , τ_{xy} – компоненты тензора напряжений; m – пористость среды, β_w – влагонасыщенность среды, ρ^* – эффективная плотность среды, g – ускорение свободного падения.

Для замыкания системы требуется включение условия совместности деформаций:

$$\Delta(\sigma_x + \sigma_y) = -(1 + \nu) \left(\frac{\partial X}{\partial x} + \frac{\partial Y}{\partial y} \right) \quad (6)$$

В условии совместности деформаций правая часть не равна нулю, т.к. сила тяжести не является единственной объемной силой действующей на среду [3]. Здесь $X = \frac{\partial P}{\partial x}$ и $Y = \frac{\partial P}{\partial y}$

Дополним получившуюся систему уравнений граничными условиями:

$$y = 0 \quad \sigma_x = 0, \sigma_y = P_0, \tau_{xy} = 0 \quad (7)$$

$$y = M \quad \frac{\partial \sigma_x}{\partial y} = 0, \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} = 0, \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0 \quad (8)$$

$$x = 0, x = L \quad \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} = 0, \frac{\partial \sigma_y}{\partial x} = 0, \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

Заметим, что для упрочняющегося мерзлого грунта задача определения предельного напряженного состояния перестает быть статически определимой, что приводит к необходимости использования условия совместности деформаций. С другой стороны для задачи предельного состояния, если известно напряженное состояние среды, то исходя из условий Кулона-Мора можно определить льдонасыщенность и водонасыщенность пор для заданной конфигурации скелета грунта.

Условие касания круга Мора прямолинейной огибающей можно записать в виде уравнения:

$$\sigma_1 \sigma_p - \sigma_2 \sigma_c - \sigma_c \sigma_p = 0 \quad (10)$$

где σ_1 и σ_2 определяются следующим образом:

$$\sigma_1 = \frac{1}{2} \left(\sigma_x + \sigma_y + \sqrt{(\sigma_x - \sigma_y)^2 + 4\tau_{xy}} \right)$$

$$\sigma_2 = \frac{1}{2} \left(\sigma_x + \sigma_y - \sqrt{(\sigma_x - \sigma_y)^2 + 4\tau_{xy}} \right)$$

Подставив зависимости (1) и (2) в (10), получим квадратное уравнение для нахождения влагонасыщенности:

$$-m^2\sigma_{p,i}\sigma_{c,i}\beta_i^2 + (\sigma_1 m\sigma_{p,i} - \sigma_2 m\sigma_{c,sc} - m(1-m)\sigma_{p,i}\sigma_{c,sc} - m(1-m)\sigma_{c,i}\sigma_{p,sc})\beta_i + \sigma_1(1-m)\sigma_{p,sc} - \sigma_2(1-m)\sigma_{c,sc} - (1-m)^2\sigma_{c,sc}\sigma_{p,sc} = 0 \quad (11)$$

При решении данного уравнения выбирается тот корень, который находится в интервале от 0 до 1.

Таким образом, мы получили задачу определения начального состояния, которое состоит из уравнений (5), (6) и (11).

Прежде чем приступить к решению задачи преобразуем систему (5) и уравнение (6). Систему (5) продифференцируем: первое уравнение по x , второе по y и выразим σ_x и σ_y через τ_{xy} :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 \sigma_y}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial y} \right) + g \frac{\partial \rho^*}{\partial y} - \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y} \end{cases}$$

Подставим полученные выражения в уравнение совместимости деформаций. Пусть $\phi = -(1+\nu) \left(\frac{\partial X}{\partial x} + \frac{\partial Y}{\partial y} \right)$, тогда:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \sigma_y}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial y} \right) + g \frac{\partial \rho^*}{\partial y} - \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y} = \Phi$$

Выразим отсюда σ_x :

$$\frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial y^2} = \Phi - \frac{\partial}{\partial x} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial y} \right) - \frac{\partial^2 \sigma_y}{\partial x^2} - g \frac{\partial \rho^*}{\partial y} + 2 \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y}$$

Продифференцируем первое уравнение системы (5) по y и найдем τ_{xy} :

$$\frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x \partial y}$$

Теперь, вместо системы (5) и уравнения (6) мы будем использовать следующие уравнения:

$$\frac{\partial^2 \sigma_y}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial y} \right) + g \frac{\partial \rho^*}{\partial y} - \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y} \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial y^2} = \Phi - \frac{\partial}{\partial x} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial y} \right) - \frac{\partial^2 \sigma_y}{\partial x^2} - g \frac{\partial \rho^*}{\partial y} + 2 \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y} \quad (13)$$

$$\frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x \partial y} \quad (14)$$

Следовательно, далее мы будем решать систему уравнений (1), (2), (12), (13), (14), (11) с граничными условиями (7), (8), (9). Данное преобразование мы проделали для того, чтобы при составлении дискретных аналогов иметь дело только с параболическими уравнениями.

Дискретная модель

Рассмотрим дискретную модель данной задачи. Первые два уравнения системы дискретизируются естественным образом:

$$T_{ij} = T_c \quad (15)$$

$$P_{ij} = P_0 + \frac{T_0 - T_{ij}}{\eta} \quad (16)$$

Разностные аналоги уравнений (12), (13), (14) выглядят следующим образом:

$$\frac{1}{\Delta y_j} \left(\frac{\sigma_{i,j+1}^y - \sigma_{i,j}^y}{\Delta y_{j+1}} - \frac{\sigma_{i,j}^y - \sigma_{i,j-1}^y}{\Delta y_j} \right) = F_{ij} \quad (17)$$

$$\frac{1}{\Delta y_j} \left(\frac{\sigma_{i,j+1}^x - \sigma_{i,j}^x}{\Delta y_{j+1}} - \frac{\sigma_{i,j}^x - \sigma_{i,j-1}^x}{\Delta y_j} \right) = F'_{i,j} \quad (18)$$

$$\frac{1}{\Delta y_j} \left(\frac{\tau_{i,j+1}^{xy} - \tau_{i,j}^{xy}}{\Delta y_{j+1}} - \frac{\tau_{i,j}^{xy} - \tau_{i,j-1}^{xy}}{\Delta y_j} \right) = F''_{i,j} \quad (19)$$

где $F_{i,j}$, $F'_{i,j}$, $F''_{i,j}$ определяются как:

$$F_{ij} = \frac{1}{\Delta y_j} \left(m_{i,j+1/2} \beta_{i,j+1/2}^w \frac{P_{i,j+1} - P_{i,j}}{\Delta y_{j+1}} - m_{i,j-1/2} \beta_{i,j-1/2}^w \frac{P_{i,j} - P_{i,j-1}}{\Delta y_j} \right) - \frac{1}{\Delta y_j} \left(\frac{\tau_{i+1,j}^{xy} - \tau_{i,j}^{xy}}{\Delta x_{i+1}} - \frac{\tau_{i,j-1}^{xy} - \tau_{i-1,j-1}^{xy}}{\Delta x_i} \right) + g \frac{\rho_{i,j}^* - \rho_{i,j-1}^*}{\Delta y_j}$$

$$F'_{i,j} = -\frac{1}{\Delta x_i} \left(\left(m_{i+1/2,j} \beta_{i+1/2,j}^w + 1 + \nu \right) \frac{P_{i+1,j} - P_{i,j}}{\Delta x_{i+1}} - \left(m_{i-1/2,j} \beta_{i-1/2,j}^w + 1 + \nu \right) \frac{P_{i,j} - P_{i-1,j}}{\Delta x_i} \right) - \frac{1}{\Delta y_j} \left(\left(m_{i,j+1/2} \beta_{i,j+1/2}^w + 1 + \nu \right) \frac{P_{i,j+1} - P_{i,j}}{\Delta y_{i+1}} - \left(m_{i,j-1/2} \beta_{i,j-1/2}^w + 1 + \nu \right) \frac{P_{i,j} - P_{i,j-1}}{\Delta y_i} \right) - \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{\sigma_{i+1,j}^y - \sigma_{i,j}^y}{\Delta x_{i+1}} - \frac{\sigma_{i,j}^y - \sigma_{i-1,j}^y}{\Delta x_i} \right) - (g + 1 + \nu) \frac{\rho_{i,j}^* - \rho_{i,j-1}^*}{\Delta y_j} + \frac{2}{\Delta y_j} \left(\frac{\tau_{i+1,j}^{xy} - \tau_{i,j}^{xy}}{\Delta x_{i+1}} - \frac{\tau_{i,j-1}^{xy} - \tau_{i-1,j-1}^{xy}}{\Delta x_i} \right)$$

$$F''_{i,j} = \frac{1}{\Delta y_j} \left(m_{i+1/2,j} \beta_{i+1/2,j}^w \frac{P_{i+1,j} - P_{i,j}}{\Delta x_{i+1}} - m_{i-1/2,j-1} \beta_{i-1/2,j-1}^w \frac{P_{i,j-1} - P_{i-1,j-1}}{\Delta x_i} \right) - \frac{1}{\Delta y_j} \left(\frac{\sigma_{i+1,j}^x - \sigma_{i,j}^x}{\Delta x_{i+1}} - \frac{\sigma_{i,j-1}^x - \sigma_{i-1,j-1}^x}{\Delta x_i} \right)$$

Далее нам необходимо дискретизировать уравнение для вычисления влагонасыщенности:

$$\beta_{i,j}^w = 1 - \frac{-B + \sqrt{D}}{2A} \quad (20)$$

где

$$A = -m_{i,j}^2 \sigma_{i,j}^{p,i} \sigma_{i,j}^{c,i}$$

$$B = \sigma_1 m_{i,j} \sigma_{i,j}^{p,i} - \sigma_2 m_{i,j} \sigma_{i,j}^{c,sc} - m_{i,j} (1 - m_{i,j}) \sigma_{i,j}^{p,i} \sigma_{i,j}^{c,sc} - m_{i,j} (1 - m_{i,j}) \sigma_{i,j}^{c,i} \sigma_{i,j}^{p,sc}$$

$$C = \sigma_1 (1 - m_{i,j}) \sigma_{i,j}^{p,sc} - \sigma_2 (1 - m_{i,j}) \sigma_{i,j}^{c,sc} - (1 - m_{i,j})^2 \sigma_{i,j}^{c,sc} \sigma_{i,j}^{p,sc}$$

$$D = B^2 - 4AC$$

$$\sigma_1 = \frac{1}{2} \left(\sigma_{i,j}^x + \sigma_{i,j}^y + \sqrt{(\sigma_{i,j}^x - \sigma_{i,j}^y)^2 + 4\tau_{i,j}^{xy}} \right)$$

$$\sigma_2 = \frac{1}{2} \left(\sigma_{i,j}^x + \sigma_{i,j}^y - \sqrt{(\sigma_{i,j}^x - \sigma_{i,j}^y)^2 + 4\tau_{i,j}^{xy}} \right)$$

Алгоритм решения

Для численного решения вышеописанной задачи применим следующий алгоритм:

1. Задаем температуру среды для этого используем (15)
2. Из (16) вычисляем давление
3. Задаем первоначальное приближение: $\tau_{xy} = 0$ и $\beta_w = 1$
4. Для решения механической задачи строим итерационный процесс:

- (a) Решаем уравнение (17) и находим σ_y , при этом τ_{xy} берем из предыдущей итерации,
- (b) Из уравнения (18) находим σ_x ,
- (c) Из уравнения (19) находим τ_{xy} текущей итерации.
- (d) Находим влагонасыщенность текущей итерации из уравнения (20)
- (e) Итерационный процесс завершается когда $Max \left| \tau_{ij}^{xy} - \tau_{ij}^{xy} \right| < \epsilon$

По завершении данного итерационного процесса мы получим распределение тензора напряжений и влагонасыщенности среды.

Результаты вычислений

Описанная модель была реализована в виде программы. Эксперименты проводились при следующих входных данных: $T_0 = 273.15K$, $P_0 = 0.101$, $\eta = 0.0765$, $g = 9.8$,

$$q = 333.5 \cdot 10^3, C_{sc} = 1920, C_w = 4190, C_i = 2090$$

$$\rho_{sc} = 2000, \rho_w = 1000, \rho_i = 910, \lambda_{sc} = 2, \lambda_w = 0.58, \lambda_i = 2.23, \nu = 1$$

$$\sigma_{c,sc} = 0.03, \sigma_{p,sc} = 0.01, \sigma_{c,i} = 1.4, \sigma_{p,i} = 0.5$$

$$M = L = 5 \text{ м.}$$

Была введена регулярная сетка размерностью 50×50 .

Напряжения σ_y по мере увеличения глубины увеличивается от 0.101 Мпа практически до 0.2 Мпа. Среда на больших глубинах испытывает большие нагрузки.

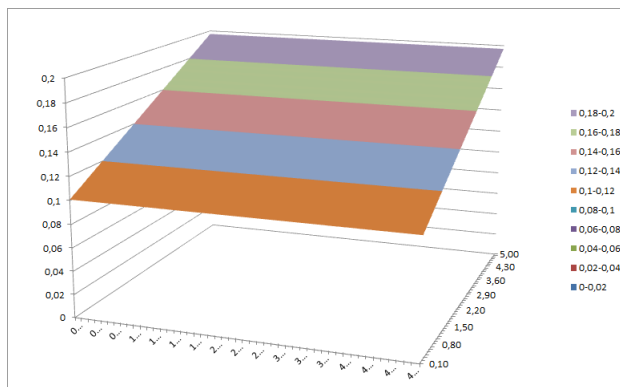


Рис. 2: Вычисленные значения σ_y

Напряжения σ_x получились нулевыми, т.е. независимо от глубины напряжений просто нет.

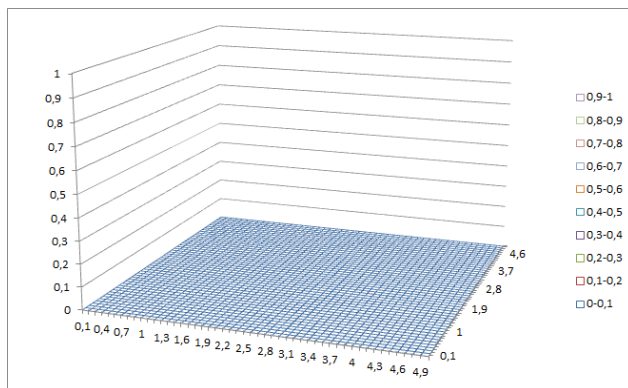


Рис. 3: Вычисленные значения σ_x

Касательные напряжения тоже равны нулю. Следовательно, среда испытывает напряжения только по оси y . Напряжения по вертикали и касательные напряжения нулевые из-за тех граничных условий, которые мы задали при постановке задачи, если зададим другие граничные условия, мы получим другие не нулевые значения.

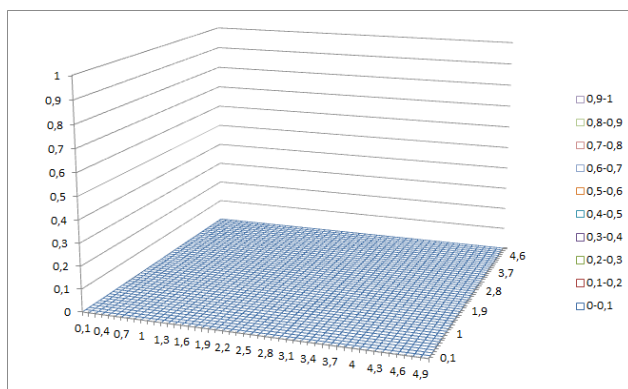


Рис. 4: Вычисленные значения τ_{xy}

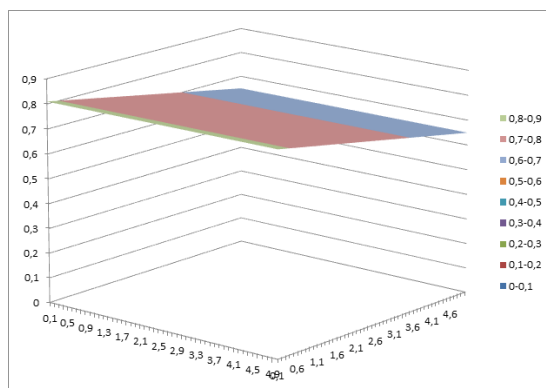


Рис. 5: Вычисленные значения влажности среды

Заключение

Численные эксперименты с данной моделью выявили ряд проблем, которые требуют дальнейших исследований.

1. Уравнение определения влагонасыщенности, которое мы вывели, работает только при маленьких значениях предельных напряжений среды на растяжение и сжатие. Т.е. эти напряжения соответствуют предельным напряжениям при 0 влагонасыщенности.
2. Вторая проблема – выбор граничных условий. Те граничные условия, которые мы выбрали в данной работе, привели к тому, что напряжения по горизонтали и касательные напряжения равны 0. Поэтому к выбору граничных условий надо подходить очень осторожно.

Конечно, работа полностью еще не закончена, т.к. приведенная в данной работе задача является подзадачей проблемы, описанной в [4]. Да и проблемы, обнаруженные при выполнении работы, требуют дополнительных исследований.

В дальнейшей своей работе авторы сконцентрируют внимание на применении разработанного алгоритма решения задачи начального состояния для реализации основной модели, а так же на решении выявленных проблем.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мордовской С.Д. Петров Е.Е. Взаимовлияние механических и температурных полей в рамках модели образования двухфазной зоны Матем. заметки ЯГУ.-1994г.-Том.1, №1. С.45-56.

- [2] Соколовский В.В. Теория пластичности. М., «Высш. школа», 1969.
- [3] Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теория упругости. М.: «Наука», 1975
- [4] Everstov V.V., Mordovskoy S.D. Two dimensional problem of thermoelasticity
Proceedings of International Conferences on Mathematical Modeling - Yakutsk,
2012 p. 25-31

Вариант обобщения метода Кабаре на треугольные сетки

Яковлев П.Г.

Северо-Восточный федеральный университет, Якутск, Россия;

yakovlevpg@s-vfu.ru

Аннотация

На основе метода Кабаре разработан новый алгоритм численного решения уравнений Эйлера описывающих течение идеального газа на расчетных областях состоящих из равносторонних треугольников. На базе разработанного алгоритма численно решены классические тестовые задачи акустики и вихревой динамики. Проведен анализ полученных результатов.

Ключевые слова: метод Кабаре, численные методы, треугольная сетка.

Благодарности: работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект РФФИ №12-02-31650).

Введение

Решение задач газовой динамики часто сопряжено с преодолением проблем связанных диссипативными и дисперсионными ошибками [1, 2]. Существует несколько путей решения данной проблемы. Так, одним из возможных подходов является повышение порядка аппроксимации схем. Основными недостатками данного подхода являются использование расширенного шаблона для аппроксимации исходных уравнений, что приводит к проблемам, как при задании граничных условий, так и при аппроксимации на произвольных расчетных сетках.

Также популярным подходом для решения подобных проблем является класс схем, записанных в дивергентной форме и с применением коррекции потоков. Ярким представителем такого класса является явная схема Кабаре [3, 4], обладающая вторым порядком аппроксимации для произвольно неоднородных сеток по пространству и времени. Несмотря на простоту реализации и «небольшой» порядок аппроксимации, она хорошо проявила себя в ряде задач газодинамики и аэроакустики [5, 6, 7]. Основными преимуществами схемы Кабаре являются её компактный вычислительный шаблон, малодисперсионность и бездиссипативность. Для решения задач нелинейного переноса в схеме Кабаре используется малодиссипативный алгоритм нелинейной коррекции потоков на основе принципа максимума для потоковых переменных.

При всех достоинствах данной схемы, ее применение ограничено набором вычислительных шаблонов, обычно состоящим в двумерном случае из четырехугольных и в трехмерном - из гексагональных элементов. Поскольку расчетные области для практически значимых задач часто невозможно разбить на четырехугольные

и гексагональные элементы, то обобщение методики Кабаре на треугольные сетки представляет не только теоретический, но и практический интерес.

Системы уравнений

Рассмотрим уравнения Эйлера описывающие течение сжимаемого идеального газа в векторном виде для двумерного случая в декартовой системе координат (x, y)

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

где векторы \mathbf{U} , \mathbf{E} , \mathbf{F} задаются выражениями

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{pmatrix}.$$

Уравнение состояния идеального газа имеет вид

$$P = \rho \varepsilon (\gamma - 1).$$

Здесь ρ - плотность, t - время, u и v - компоненты скорости \mathbf{v} по осям OX и OY соответственно, P - давление, E - удельная полная энергия, $\varepsilon = E - \frac{u^2}{2} - \frac{v^2}{2}$ - удельная внутренняя энергия, γ - показатель адиабаты.

При предположении, что в пределах одной пространственно - временной ячейки течение удовлетворяет условию изэнтропичности, систему (1) можно привести к характеристическому виду

$$\begin{cases} \frac{\partial F_1}{\partial t} + \lambda_1 \frac{\partial F_1}{\partial x} = q_1 \\ \frac{\partial F_2}{\partial t} + \lambda_2 \frac{\partial F_2}{\partial x} = q_2 \\ \frac{\partial F_3}{\partial t} + \lambda_3 \frac{\partial F_3}{\partial x} = q_3 \\ \frac{\partial F_4}{\partial t} + \lambda_4 \frac{\partial F_4}{\partial x} = q_4. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь $G = \frac{2\sqrt{\gamma}}{\gamma-1} \left(\frac{P}{\rho^\gamma}\right)^{\frac{1}{2\gamma}}$, $c^2 = \frac{\gamma P}{\rho}$ - скорость звука, q_* - некоторая правая часть.

$$\begin{cases} \lambda_1 = u + c \\ \lambda_2 = u - c \\ \lambda_3 = u \\ \lambda_4 = u, \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} F_1 = u + G \cdot P^{(\gamma-1)/2\gamma} \\ F_2 = u - G \cdot P^{(\gamma-1)/2\gamma} \\ F_3 = \ln \frac{P}{\rho^\gamma} \\ F_4 = v. \end{cases} \quad (4)$$

Величины F_1, F_2, F_3, F_4 будем в дальнейшем называть локальными инвариантами Римана.

Разностная схема

Рассмотрим расчетную область, составленную из равносторонних треугольных элементов. К центрам треугольников (точкам пересечения медиан) будем относить т.н. «консервативные» переменные: плотность RO_C , компоненты скорости U_C, V_C и полная энергия ET_C . К серединам граней треугольников - т.н. «потокосые» переменные: плотность $\rho_{i,j}$, компоненты скорости $u_{i,j}, v_{i,j}$ и давление $p_{i,j}$.

Здесь и далее для определенности будут использоваться следующие обозначения: нижний индекс $(*)_C$ обозначает переменные в центрах треугольников; $(*)_{i,j}$ - переменные в центрах граней с вершинами $i \neq j$ (см. Рис. 1), верхние индексы $(*)^n, (*)^{n+1/2}, (*)^{n+1}$ обозначают переменные на текущем, промежуточном слое с шагом $\Delta \tau/2$ и на новом слое по времени соответственно.

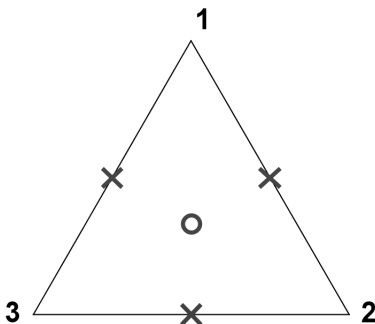


Рис. 1: Элемент. «Круг» – консервативные переменные, «крест» - потокосые.

Пусть в некоторый момент времени t^n известны все как консервативные, так и потокосые переменные. Алгоритм вычисления новых значений переменных на последующем временном слое, для удобства изложения, разобьем на три фазы: в первой фазе, вычисляются значения консервативных переменных на промежуточном временном слое $t^{n+1/2}$; во второй фазе – потокосые переменные на новом временном слое; и на третьей фазе – вычисляются консервативных переменные на новом временном слое.

Вычисление консервативных переменных

Для решения уравнений Эйлера в первой и третьей фазах проинтегрируем систему уравнений (1) по площади треугольника и, используя свойство дивергентности и

теорему Гаусса – Остроградского, перейдем, где это можно, от интегралов по площади к интегралам по границе области

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_G \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy + \oint_{\partial G} \rho u dy - \oint_{\partial G} \rho v dx = 0 \\ \iint_G \frac{\partial \rho u}{\partial t} dx dy + \oint_{\partial G} \rho u^2 dy - \oint_{\partial G} \rho u v dx + \oint_{\partial G} P dy = 0 \\ \iint_G \frac{\partial \rho v}{\partial t} dx dy + \oint_{\partial G} \rho u v dy - \oint_{\partial G} \rho v^2 dx - \oint_{\partial G} P dx = 0 \\ \iint_G \frac{\partial \rho E}{\partial t} dx dy + \oint_{\partial G} \rho E u dy - \oint_{\partial G} \rho E v dx + \oint_{\partial G} P u dy - \oint_{\partial G} P v dx = 0. \end{array} \right.$$

Интегралы по границам аппроксимируем квадратурной формулой. Тогда процесс вычисления консервативных переменных на промежуточном и новом шагах по времени можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\varphi_C^{n+1/2} - \varphi_C^n}{\Delta\tau/2} + Flux(\varphi^n) &= 0, \\ \frac{\varphi_C^{n+1} - \varphi_C^{n+1/2}}{\Delta\tau/2} + Flux(\varphi^{n+1}) &= 0. \end{aligned}$$

Здесь $\varphi = (\rho, u, v, E)^T$, $Flux(\varphi^k)$ - потоки через ребра элемента вычисленные на шаге k , $\Delta\tau$ - шаг по времени.

Вычисление потоковых переменных

Рассмотрим отдельно взятое «внутреннее» (не граничное ребро) и два смежных с ним элемента. Для нахождения новых значений потоковых переменных на ребрах элементов будем использовать характеристическую форму (2) представления уравнений, записанную для нормали к рассматриваемому ребру.

Введем внутреннюю нумерацию как показано на Рис.2. По известным значениям консервативных и потоковых переменных на текущем и промежуточном слоях по времени, в соответствии с (4) вычислим значения локальных инвариантов $(F_k)_{1,2}^n, (F_k)_{2,3}^n, (F_k)_{3,4}^n, (F_k)_{4,1}^n, (F_k)_{4,2}^n, (F_k)_C^n, (F_k)_C^{n+1/2}$, $k = 1, 2, 3, 4$. Значения потоковых переменных на новом временном слое на ребре с номерами узлов 4 и 2, можно однозначно определить, если на новом временном слое будут известны локальные Римановы инварианты $(F_k)_{4,2}^{n+1}$, $k = 1, 2, 3, 4$.

Поскольку временная эволюция локальных Римановых инвариантов описывается уравнениями переноса, то область зависимости каждого из инвариантов на конкретном ребре зависит от знака соответствующего собственного числа.

Без ограничения общности определим «переднюю» (F) и «заднюю» (B) элементы как показано на Рис.2, и выделим нормаль, направленную в сторону «передней ячейки». Тогда

$$\left\{ \begin{array}{l} |\vec{n}| = 1 \\ l_n = \sqrt{(y_2 - y_4)^2 + (x_2 - x_4)^2} \\ n_x = \frac{y_2 - y_4}{l_n} \\ n_y = \frac{-(x_2 - x_4)}{l_n}. \end{array} \right.$$

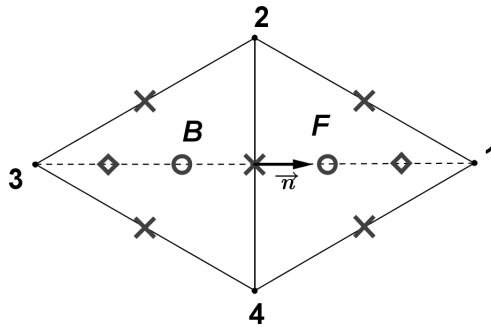


Рис. 2: Ребра и смежные элементы.

Так как собственные числа определены в центрах ячеек, то область зависимости точки в середине ребра будем определять по знаку их средних значений

$$(\bar{\lambda}_k)_{4,2} = \frac{(\lambda_k)_{CF} + (\lambda_k)_{CB}}{2}, k = 1, 2, 3, 4.$$

Если $(\bar{\lambda}_k)_{4,2} \geq 0$, то областью влияния является «задняя» ячейка, в противном случае – «передняя».

Введем вспомогательные переменные на обоих смежных элементах, вычисляемые на расстоянии $2/3$ длины медианы от центра искомого ребра на текущем временном слое (на Рис.(2) обозначено квадратом).

Рассмотрим следующую формулу для экстраполяции инвариантов Римана в данную точку:

$$\begin{cases} (F_k)_{*B}^n = 2 \frac{(F_k)_{4,3}^n + (F_k)_{3,2}^n + (F_k)_{4,2}^n}{3} - (F_k)_{4,2}^n \\ (F_k)_{*F}^n = 2 \frac{(F_k)_{2,1}^n + (F_k)_{1,4}^n + (F_k)_{4,2}^n}{3} - (F_k)_{4,2}^n \end{cases}, k = 1, 2, 3, 4 \quad (5)$$

После этого новые значения локальных инвариантов $(F_k)_{4,2}^{n+1}$, $k = 1, 2, 3, 4$ на выделенном ребре вычисляются со вторым порядком точности экстраполяцией из прилегающей ячейки, являющейся зоной влияния, т.е. с учетом направления прихода характеристики.

$$(F_k)^{n+1} = \begin{cases} 2 \cdot (F_k)_{CB}^{n+1/2} - (F_k)_{*B}^n, & \text{if } \bar{\lambda}_k \geq 0 \\ 2 \cdot (F_k)_{CF}^{n+1/2} - (F_k)_{*F}^n, & \text{if } \bar{\lambda}_k < 0 \end{cases}, k = 1, 2, 3, 4. \quad (6)$$

Отметим, что данный вид экстраполяции инвариантов Римана (6) применяется в методе Кабаре для ортогональных сеток, но из-за геометрических особенностей, вместо дополнительно введенных инвариантов $(F_k)_{*B}^n$ и $(F_k)_{*F}^n$ используются потоковые переменные.

Затем по значениям локальных инвариантов $(F_k)_{4,2}^{n+1}$ на новом временном слое по (4) вычисляем предварительные потоковые переменные $\tilde{u}_{4,2}^{n+1}$, $\tilde{v}_{4,2}^{n+1}$, $\tilde{\rho}_{4,2}^{n+1}$, $\tilde{P}_{4,2}^{n+1}$.

Процедура дополнительной коррекции

Для контроля за немонотонностью решения, была использована стандартная процедура добавления «искусственной вязкости»

$$\begin{cases} u_{4,2}^{n+1} = \frac{1}{2} \tilde{u}_{4,2}^{n+1} + \frac{1}{2} \frac{(\tilde{u}_{1,2}^{n+1} + \tilde{u}_{2,3}^{n+1} + \tilde{u}_{3,4}^{n+1} + \tilde{u}_{4,1}^{n+1})}{4} \\ v_{4,2}^{n+1} = \frac{1}{2} \tilde{v}_{4,2}^{n+1} + \frac{1}{2} \frac{(\tilde{v}_{1,2}^{n+1} + \tilde{v}_{2,3}^{n+1} + \tilde{v}_{3,4}^{n+1} + \tilde{v}_{4,1}^{n+1})}{4} \\ \rho_{4,2}^{n+1} = \frac{1}{2} \tilde{\rho}_{4,2}^{n+1} + \frac{1}{2} \frac{(\tilde{\rho}_{1,2}^{n+1} + \tilde{\rho}_{2,3}^{n+1} + \tilde{\rho}_{3,4}^{n+1} + \tilde{\rho}_{4,1}^{n+1})}{4} \\ P_{4,2}^{n+1} = \frac{1}{2} \tilde{P}_{4,2}^{n+1} + \frac{1}{2} \frac{(\tilde{P}_{1,2}^{n+1} + \tilde{P}_{2,3}^{n+1} + \tilde{P}_{3,4}^{n+1} + \tilde{P}_{4,1}^{n+1})}{4}. \end{cases}$$

Результаты тестовых расчетов

Апробация нового алгоритма проводилась на тестовых задачах об акустическом возмущении и вихре Гаусса. Для обеих задач в качестве расчетной области рассматривался ромб, элементы которого являлись равносторонними треугольниками. На границах были заданы условия "неотражения".

Акустическое возмущение

В покоящейся среде с начальными данными $P_0 = 1$, $\rho_0 = 1$, $\mathbf{v}_0 = 0$, задан акустический импульс $\delta\varepsilon = Ae^{-B(\frac{r}{r_0})^2}$ с параметрами $A = 10^{-4}$, $B = \ln 2$, $r_0 = 3 \cdot 10^{-2}$, где r – расстояние до центра импульса.

Аналитическое решение в центре акустического импульса имеет вид:

$$f(0, t) = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{P_0}{\rho_0} + \gamma A \left(1 - 2 \sqrt{\frac{\gamma B}{r_0^2}} D \left(\sqrt{\frac{\gamma B}{r_0^2}} t \right) t \right)$$

где $D(x) = e^{-x^2} \int_0^x e^{-y^2} dy$ - интеграл Доусона.

На Рис.3(а) показан результат численного расчета в центре акустического импульса. Показано, что численное решение практически совпадает с аналитическим, и сходимость имеет второй порядок точности (см. Таблицу 1). Импульс распространяется симметрично относительно горизонтальной и вертикальной линий проходящих через центр импульса, что продемонстрировано на Рис.3(б).

Вихрь Гаусса

В покоящемся пространстве $P_0 = 1$, $\rho_0 = 1$, $\mathbf{v}_0 = 0$ задан вихрь Гаусса с параметрами $\alpha = 0.204$, $\beta = 0.3$, $r_0 = 0.05$:

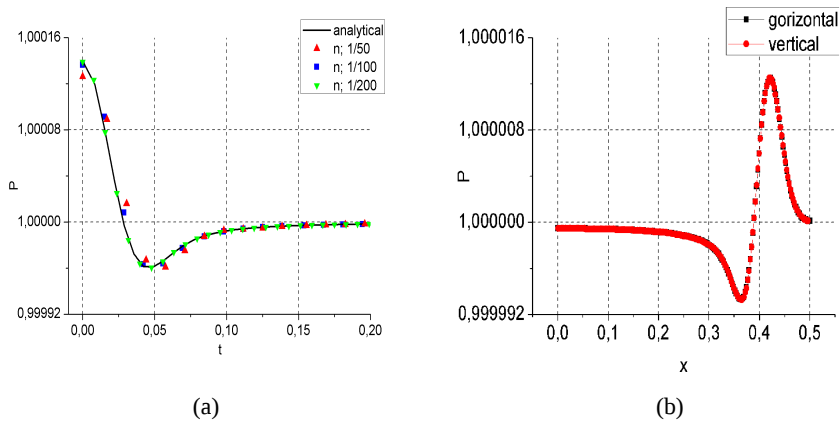


Рис. 3: Акустический импульс (а) - кинетическая энергия, (б) - завихренность.

Таблица 1: Порядок точности в центре акустического импульса.

| Δh | $\ z\ _C$ | α | $\ z\ _{L_1}$ | α | $\ z\ _{L_2}$ | α |
|------------|-----------|----------|---------------|----------|---------------|----------|
| 1/50 | 1,79E-05 | | 4,98E-07 | | 2,13E-06 | |
| 1/100 | 4,71E-06 | 1,93 | 1,11E-07 | 2,16 | 5,38E-07 | 1,98 |
| 1/150 | 2,11E-06 | 1,98 | 4,97E-08 | 1,98 | 2,40E-07 | 1,99 |
| 1/200 | 1,19E-06 | 1,99 | 2,82E-08 | 1,97 | 1,36E-07 | 1,98 |

$$\begin{cases} u(\eta) = \alpha \cdot \eta \cdot \exp[\beta \cdot (1 - \eta^2)] \\ P = \frac{P_0}{\rho_0} (1 + \delta T) \rho \\ \rho = \rho_0 (1 + \delta T)^{\frac{1}{\gamma-1}} \\ \delta T = - \left(\frac{\rho_0}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \frac{\alpha^2}{4\beta} e^{2\beta(1-\eta^2)} \\ \eta = \frac{r}{r_0} \end{cases}$$

На Рис.4(a) показана зависимость кинетической энергии от плотности сетки. Из рисунка видно, что кинетическая энергия со временем переходит во внутреннюю энергию, но при увеличении плотности сетки данный процесс замедляется. На Рис.4(b) продемонстрированы график завихренности через каждые 25 оборотов, начиная с начального положения.

Заключение

В работе приведен вариант обобщения метода Кабаре на треугольные сетки, который включает себя новую экстраполяционную формулу для вычисления потоков на новом временном слое и отличную - от классического случая - процедуру

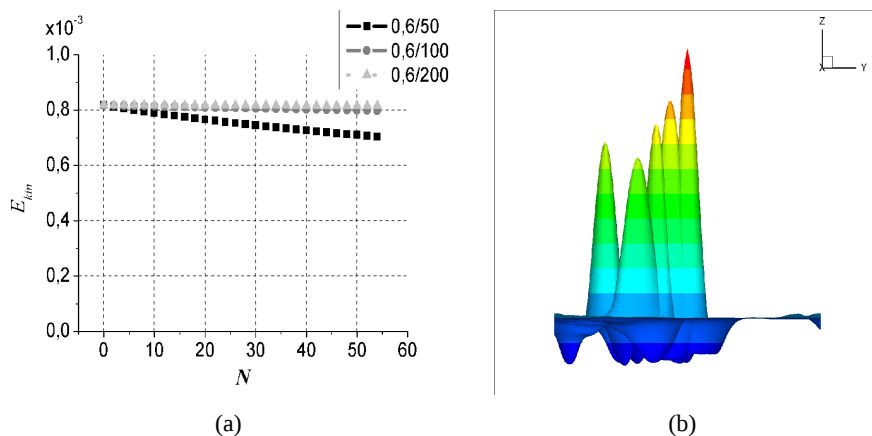


Рис. 4: Вихрь Гаусса в зависимости от количества оборотов (а) - кинетическая энергия, (б) - завихренность.

монотонизации получаемого решения. На основе разработанного алгоритма была численно решена задача об акустическом импульсе. Показано, что новый алгоритм имеет второй порядок аппроксимации на сетке состоящей из равносторонних треугольников. Продемонстрирована симметричность распространения импульса. Проведено численное моделирование вихря Гаусса, начальное положение которого соответствует стационарному решению. Показано, что на сетке с плотностью 5 ячеек на радиус кинетическая энергия вихря падает менее чем на 15%.

На основе полученных результатов можно сделать вывод, что новый алгоритм представляет интерес для дальнейших исследований с целью обобщения метода Кабаре на треугольные сетки.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н. Системы квазилинейных уравнений. М.: Наука, 1978.
- [2] Hirsch C. Numerical Computation of Internal and External Flows. The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics. 2nd Edition. John Wiley&Sons, Ltd 2007.
- [3] Самарский А.А., Головизнин, В.М. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной. Математическое моделирование, 1998, 10:1, 86–100
- [4] Самарский А.А., Головизнин, В.М. Некоторые свойства разностной схемы “Кабаре” Математическое моделирование, 1998, 10:1, 101–116.

- [5] Karabasov, S. A. and Goloviznin, V.M. A New Efficient High-Resolution Method for Non-Linear problems in Aeroacoustics. AIAA Journal, 2007, vol. 45, no. 12, pp. 2861 – 2871.
- [6] Головизнин В.М., Карабасов С.А., Яковлев П.Г. Прямое моделирование взаимодействия вихревых пар. Математическое моделирование, т.23 №11 2011г. стр. 21-32.
- [7] Яковлев П.Г. Излучение звука плоским локализованным вихрем. Акустический журнал, том 58, № 4, Июль-Август 2012, стр. 563-568.

Simulation of hydrate formation in gas wells at thermal interaction with rocks

Edward A. Bondarev¹, Igor I. Rozhin¹, Kira K. Argunova¹

¹*Institute of Oil and Gas Problems, Siberian Division, Russian Academy of Sciences,
Yakutsk, Russia;*
bondarev@ipng.ysn.ru
rozhin@ipng.ysn.ru

Abstract

The problems of thermal interaction of gas wells with rocks belong to conjugated problems of heat transfer. Their models include the equation of heat conduction describing propagation of heat in rocks with possible thawing and freezing, the equations of non-isothermal real gas flow in tube with corresponding boundary and initial conditions instituted by nature of linking of heat flows on a tube wall. The quasi-stationary mathematical model is used for the problem of formation (dissociation) of hydrates in gas wells. In this model real gas flow was described in the frame work of tube hydraulic while dynamics of hydrate formation was formulated as generalized Stefan problem in which temperature of phase transition "gas – hydrate" was a function of gas pressure. The model takes into account the dependence of coefficient of heat transfer between gas and hydrate layer on free cross section of a tube, that is, it's changing with time. Gas production from the fields with essentially different composition of natural gas, reservoir and geothermal conditions, depths of productive horizon was simulated. Initial values of a free cross section of a tube and a mass flow rate were varied. It has been shown that the conjugated model predicts that the time of formation of hydrate plugs essentially increases in comparison with the model where the temperature of surrounding rocks is considered a given function of depth.

Keywords: mathematical modeling, imperfect gas, gas hydrate, gas well.

Introduction

Technology of natural gas production in Northern regions substantially depends on such environmental factors as low climatic temperatures and thick permafrost layers. They lead to complications which are mainly connected with gas hydrate formation in bottom-hole zone and in gas wells. The former lowers well productivity, while the latter — to full its blockage. Today the only means to prevent hydrate formation is pumping methanol or other inhibitors at the well head. It is not rational because inhibitors go away with gas flow.

Heat transfer between flowing gas and surrounding rocks, throttle effect and adiabatic expansion (compression) lower gas temperature in wells but also change rock temperature. These changes are interconnected, so to predict temperature regime of gas wells one has to solve the conjugated problem of simultaneous temperature calculation in gas well and in surrounding rocks. Thereby mathematical model of the process in question has to include the equation of heat conduction in rocks taking into account their possible thawing (freezing), the equations of non-isothermal gas flow in a well and corresponding initial and boundary conditions which depend on coupling of thermal fluxes.

Formulation of the problems

Quasi-stationary mathematical model of hydrate formation in producing wells is used here [1]. It includes the equations of real gas flow and the equation which describes the dynamics of hydrate layer on tube walls in the frame of a generalized Stefan problem in which phase transition temperature substantially depends on flowing gas pressure. The model is based on the conservation of mass and energy laws. It can be reduced to the following two equations:

$$\frac{dp}{dx} = -\rho g \sin \varphi - \frac{\sqrt{\pi} \psi M^2}{4\rho S^{2.5} S_0^{2.5}}, \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dx} - \varepsilon \frac{dp}{dx} = \frac{\pi D \alpha}{c_p M} (T_e - T) - \frac{g}{c_p} \sin \varphi, \quad (2)$$

where ρ – gas density, g – gravity acceleration, c_p – specific heat content of gas; S , D – tube cross section and diameter; x – coordinate along tube axes, p – pressure, φ – inclination angle between tube and horizontal plane, ψ – coefficient of hydraulic resistance, T_e – rock temperature, T – gas temperature, α – total coefficient of heat transfer, $M = \rho v S$ – mass flow rate (constant), v – gas velocity; zero low indices means initial state.

Gas density depends on pressure and temperature via the state equation

$$\rho = \frac{p}{zRT}, \quad z = z(p, T), \quad \varepsilon = \frac{RT^2}{c_p p} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_p, \quad (3)$$

where $R = 8.314/\mu$ – gas constant, $\mu = \sum_{i=1}^n y_i \mu_i$ – molar mass of gas mixture; y_i , μ_i – volume content and molar mass of i -th gas component; z – compressibility coefficient of real gas, ε – throttle coefficient.

It has been shown [2] that for broad changes of pressure and temperature the compressibility coefficient can be approximated by the following formulae [3]:

$$z = \left(0.17376 \ln \frac{T}{T_c} + 0.73 \right)^{\frac{p}{p_c}} + 0.1 \frac{p}{p_c}.$$

Critical pressure and temperature are calculated according to W. B. Kay's rule [4]:

$$p_c = \sum_{i=1}^n y_i p_{ci}, \quad T_c = \sum_{i=1}^n y_i T_{ci},$$

where p_{ci} , T_{ci} – critical pressure and temperature of i -th component of natural gas.

The equation of tube free cross section S dynamics has the following dimensionless form:

$$\frac{dS}{d\tau} = b_2 \frac{T_e - T_h(p)}{1 - b_2 \ln S} - b_1 \sqrt{S} (T_h(p) - T), \quad (4)$$

where $b_1 = \frac{\alpha_1 D_0}{4\lambda_h}$, $b_2 = \frac{\alpha_2 D_0}{4\lambda_h}$, α_1 – coefficient of heat transfer between gas and inner surface of hydrate layer; α_2 – coefficient of heat transfer between outer surface of hydrate layer and rocks, λ_h – heat conductivity of hydrate, $\tau = \frac{\lambda_h T_c}{\rho_h l_h D_0^2} t$ – dimensionless time, ρ_h – hydrate density, l_h – latent heat of hydrate formation, t – time, $T_h(p) = a \ln p + b$ – equilibrium temperature of hydrate formation. Empirical coefficients a and b can be found through approximation of an equilibrium curve which is calculated according to E. D. Sloan [5], the gas mixture content being known.

Initial conditions for equations (1), (2) and (4) are:

$$p(0) = p_0, \quad T(0) = T_0, \quad S(0) = S_0. \quad (5)$$

Here the equation (4) is modified to take into account the relation between the coefficient α_1 and the time changing tube cross section S . It can be derived from the well known semi-empirical formulae of heat transfer coefficient for turbulent flow in tubes [6]:

$$\text{Nu} = 0.023 \text{Pr}^{0.43} \text{Re}^{0.8}, \quad (6)$$

where $\text{Nu} = \frac{\alpha_1 D}{\lambda_g}$, $\text{Pr} = \frac{v D \rho}{\mu_g}$ – Nusselt, Prandtl and Reynolds parameters, correspondingly; μ_g , λ_g – dynamical viscosity and conductivity of gas.

Adding to formulae (6) definition of mass flow rate after some manipulations one receive:

$$\frac{\alpha_1 D_0}{\lambda_g} = 0.023 \text{Pr}^{0.43} \left(\frac{M_0}{D_0 \mu_g} \right)^{0.8} \left(\frac{\pi}{4} \right)^{0.1} \frac{M^{0.8}}{S^{0.9}}. \quad (7)$$

In those parts of well where the hydrate layer is forming, that is, where dimensionless cross section S less than 1, heat transfer coefficient in the equation (2) is calculated

according to the formulae (7). Simultaneously instead of rock temperature T_e one should use the equilibrium temperature of hydrate formation T_h .

Equations (2) and (4) include rock temperature T_e , which can be found from the solution of heat conductivity equation

$$\tilde{C}(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right), \quad r_1 < r < r_2, \quad t > 0, \quad (8)$$

where $\lambda(T_e)$ – heat conductivity, $\tilde{C}(T_e)$ – volume heat content of rocks, both are piecewise functions of temperature; r – radial coordinate, r_1 – outer radii of well, r_2 – coordinate of reservoir boundary.

The equation (8) has been written with the assumption that heat flux in each well cross section is strictly radial. The connection between cross sections is realized via the solutions of equation (2) and boundary condition on outer well surface

$$\lambda(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} = \alpha(T_e - T), \quad r = r_1. \quad (9)$$

In rocks around well from the bottom hole to the lower permafrost boundary the coefficients in the equation (8) are constants and its solution can be found by standard procedures. In permafrost region the problem is more complicated because of phase transition ice – water. Today for numerical solution of the Stefan problem the procedures based on the approach proposed in the monograph [7] are used. The authors of papers [8, 9] have developed the fast finite difference scheme with smoothing of discontinuous coefficients in the equation (8) along temperature in the vicinity of phase transition. Due to the fact that the phase transition moving boundary is not calculated explicitly such finite difference schemes are homogenous. At such approach the latent heat $W = l_{ph} \rho_r w_r$ is added as lumped heat capacity to the coefficient $\tilde{C}(T_e)$. Here l_{ph} , T_{ph} – latent heat and temperature of phase transition ice – water, ρ_r – density, w_r – water content of rocks.

The condition of heat insulation is supposed to be valid on the reservoir boundary:

$$\frac{\partial T_e}{\partial r} = 0, \quad r = r_2. \quad (10)$$

Initial rock temperature is set in the following form:

$$T_e = \begin{cases} T_{e0} - \Gamma x, & 0 < x < L - H \\ T_{cr}, & L - H < x < L \end{cases}, \quad (11)$$

where T_{e0} – bottom hole temperature, Γ – geothermal gradient, T_{cr} – permafrost temperature, L – well depth, H – permafrost depth.

Algorithm of numerical solution of the problem (1) – (11) consists of the following items.

I. Assign the geometry of the domain and physical parameters as well as initial conditions (5) and (11).

II. At a given cross section from the equations (1) – (3) find gas pressure $p(x)$ and temperature $T(x)$ in well using the fourth order Runge-Kutta method.

III. Making a step in time from equations (4) and (7), find a new cross section bearing in that coordinate x enters equation (4) as parameter.

IV. Find distribution of rock temperature, that is, solve the problem (8) – (11). Because the smoothed coefficients of the equation (8) depend on temperature, the corresponding difference problem will be non-linear one. For its solution one can use an iteration procedure together with sweeping algorithm.

Items II - IV are repeated at each time step

The algorithm of calculations takes into account the significant difference of time scales for flowing gas and heat conduction in rocks: transient processes in a well are very short and that is why gas temperature follows slow temperature changes in rocks.

Results and Discussion

Calculations were performed for two sets of parameters corresponding to the gas fields of the Sakha (Yakutiya) Republic:

1) Middle-Viluy $\alpha = 5.82 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$, $D = 0.1 \text{ m}$, $\varphi = 90^\circ$, $\psi = 0.02$, $\rho_h = 920 \text{ kg}/\text{m}^3$, $l_h = 510000 \text{ J}/\text{kg}$, $\lambda_h = 1.88 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$, $\lambda_g = 0.0307 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$, $c_p = 2300 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$, $Pr = 0.886$, $\mu_g = 1.3 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$, $R = 449.4 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$, $p_0 = 240 \cdot 10^5 \text{ Pa}$, $T_0 = 323 \text{ K}$, $p_c = 46.573 \cdot 10^5 \text{ Pa}$, $T_c = 205.239 \text{ K}$, $a = 7.009 \text{ K}$, $b = 178.28 \text{ K}$, $L = 2550 \text{ m}$, $H = 500 \text{ m}$, $T_{e0} = 328 \text{ K}$, $\Gamma = 0.0277 \text{ K}/\text{m}$, $T_{cr} = 271.15 \text{ K}$, $T_{ph} = 273.15 \text{ K}$; $l_{ph} = 334400 \text{ J}/\text{kg}$; gas content (volume fraction, %): $CH_4 - 90.34$, $C_2H_6 - 4.98$, $C_3H_8 - 1.74$, $iC_4H_{10} - 0.22$, $nC_4H_{10} - 0.41$, $C_5H_{12+} - 1.55$, $CO_2 - 0.28$, $N_2 - 0.48$;

2) Otradninskoe $R = 438.3 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$, $D = 0.146 \text{ m}$, $p_0 = 188.35 \cdot 10^5 \text{ Pa}$, $T_0 = 286.35 \text{ K}$, $p_c = 44.71 \cdot 10^5 \text{ Pa}$, $T_c = 195.376 \text{ K}$, $a = 6.635 \text{ K}$, $b = 182.951 \text{ K}$, $L = 2480 \text{ m}$, $H = 680 \text{ m}$, $T_{e0} = 286.48 \text{ K}$, $\Gamma = 0.0085 \text{ K}/\text{m}$; gas content (volume fraction, %): $CH_4 - 83.15$, $C_2H_6 - 4.16$, $C_3H_8 - 1.48$, $iC_4H_{10} - 0.17$, $nC_4H_{10} - 0.50$, $iC_5H_{12} - 0.12$, $nC_5H_{12} - 0.17$, $C_6H_{14} - 0.17$, $C_7H_{16+} - 0.28$, $CO_2 - 0.07$, $N_2 - 9.50$; $H_2 - 0.02$, $He - 0.21$; the rest of the parameters as in the first set.

One can see that the fields are characterized by essentially different gas contents, by reservoir and geometrical conditions with approximately equal reservoir depth. Rock properties were supposed the same for both fields (Table 1, where lower indices correspond to: th – thawed, f – frozen).

Initially an optimal mass flow rate which corresponds to minimal heat losses in well without hydrate layer was calculated. For the Middle-Viluy gas field it was equal to 9 kg/s, for the Otradninskoe gas field - to free mass flow rate (the highest limit), so it was decided to put it equal to 2.86 kg/s, that is 187000 m³/day which corresponds to the real

Table 1: Physical properties of rocks

| Depth intervals, m | ρ_r , kg/m ³ | w_r , % | λ_{th} , W/(m·K) | λ_f , W/(m·K) | C_{th} , kJ/(m ³ ·K) | C_f , kJ/(m ³ ·K) |
|--------------------|------------------------------|-----------|--------------------------|-----------------------|-----------------------------------|--------------------------------|
| 0 – 86 | 2000 | 12.0 | 1.69 | 1.93 | 2570 | 2310 |
| 86 – <i>H</i> | 2000 | 12.0 | 1.62 | 1.86 | 2680 | 2420 |
| <i>H</i> – 980 | 2300 | 6.0 | 2.00 | - | 2440 | - |
| 980 – 1831 | 2350 | 5.5 | 2.27 | - | 2420 | - |
| 1831 – 2561 | 2380 | 5.3 | 2.38 | - | 2420 | - |
| 2561 – <i>L</i> | 2330 | 5.7 | 2.10 | - | 2440 | - |

case. The following numerical experiment was performed for different values of initial cross section and mass flow rate.

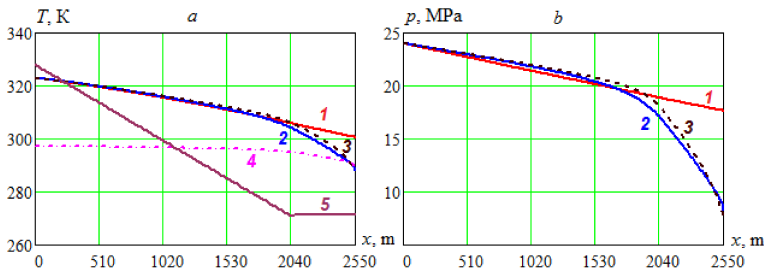


Fig. 1: Gas temperature (a) and pressure (b) vs. well depth for Middle-Viluy gas field at $M = 9$ kg/s: 1 – $t = 0.34$ h, 2 – $t = 251.6$ h, 3 – $t = 423.6$ h (conjugated model), 4 – equilibrium temperature of hydrate formation, 5 – initial temperature of rocks

More interesting results were received for the Middle-Viluy gas field (see Figures 1 – 5). First of all mention that in a mass flow rate is optimal, hydrate plug is formed near well head and its lower boundary is much higher than permafrost bottom, which is clearly seen at Fig. 1a where point of intersection of gas temperature curves (curves 2 and 3) with hydrate formation curve 4 corresponds to the depth of $2550 - 2504 = 46$ m. It means that at this interval gas temperature is lower than equilibrium temperature of hydrate formation. Reduction of tube cross section is accompanied by sharp decrease of gas pressure near well head (Fig. 1b). Gas temperature and pressure in the upper part of well are higher and the lower depth of hydrate plug is a little less (34 m) if calculated via conjugated model than when rock temperature does not changed in time (simplified mode) (curves 3 at Fig. 1a and Fig. 1b).

Fig. 2 shows the dynamics of free cross section along the well for two mass flow rates when initially it is free from hydrate, that is when $S(0) = 1$. It is seen that for the conjugated model the duration of plug formation is much longer (see surface 2) than for the simplified one (see surface 1). The higher mass flow rate the longer duration of

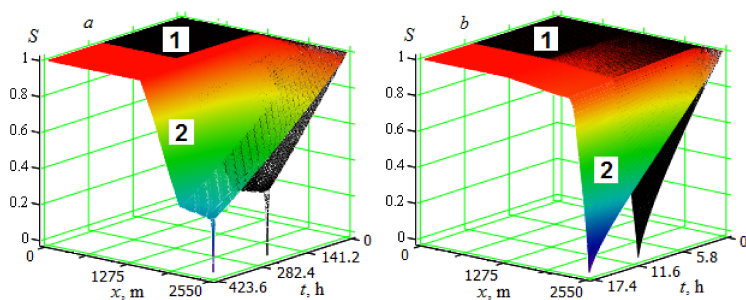


Fig. 2: Dimensionless free cross section vs. depth and time at $S(0) = 1$ for Middle-Viluy gas field: a) $M = 9$ kg/s; b) $M = 2$ kg/s; 1 – non-conjugated model, 2 – conjugated model

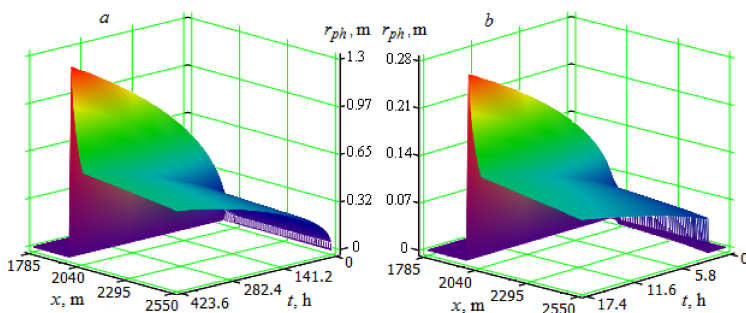


Fig. 3: Dynamics of thawing zone around gas well for Middle-Viluy gas field at $S(0) = 1$: a) $M = 9$ kg/s; b) $M = 2$ kg/s

plug formation: for the optimal value it takes about 424 hours for the conjugated model and 252 hours for the simplified one, for lower mass flow rate (2 kg/s) - 17 hours and 10 hours, correspondingly. During plug formation the highest permafrost thawing takes place near its lower boundary, which is due to comparatively high gas temperature. The radius of thawing zone is approximately proportional to mass flow rate (compare Fig. 3a and Fig. 3b).

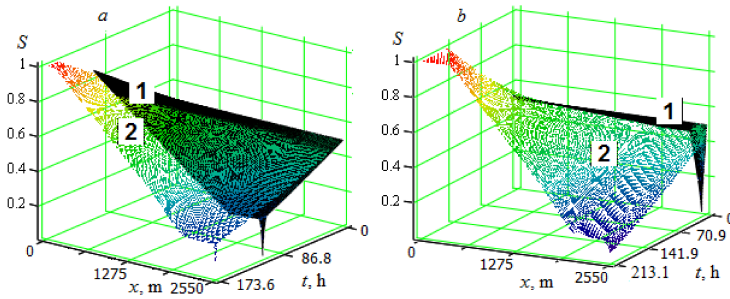


Fig. 4: Dimensionless free cross section vs. depth and time at $S(0) = 0.5$ for Middle-Viluy gas field: a) $M = 4.8$ kg/s; b) $M = 2$ kg/s; 1 – non-conjugated model, 2 – conjugated model

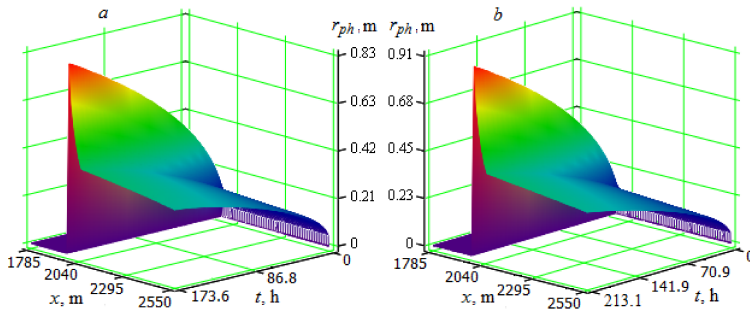


Fig. 5: Dynamics of thawing zone around gas well for Middle-Viluy gas field at $S(0) = 0.5$: a) $M = 4.8$ kg/s; b) $M = 2$ kg/s

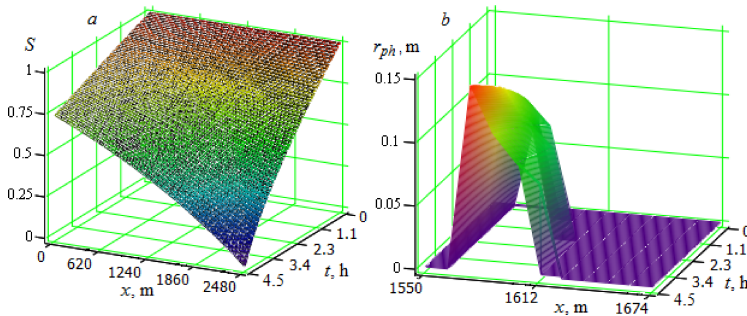


Fig. 6: Dimensionless free cross section vs. depth and time (a) and thawing zone around gas well (b) for Otradninskoe gas field at $S(0) = 1$ and $M = 2.86$ kg/s

The situation becomes less predictable if initially a well is partially blocked by

hydrates, for example, if $S(0) = 0.5$ (Figures 4 and 5). In this case an optimal mass flow rate is 4.8 kg/s. Here a well will be plugged near well head after 173 hours (Fig. 4a, surface 2) for conjugated model and after 90 hours (Fig. 4a, surface 1) for non-conjugated model. The lower plug boundary is at the depth of 105 m. For mass flow rate 2 kg/s at the lower part of a well, from bottom hole to the depth of about 1300 m free cross section increases with time and finally hydrate layer disappears completely. In the higher part of a well thickness of the layer increases forming a plug near well head after 213 hours for conjugated model and after 11 hours for non-conjugated model (Fig. 4b). In this case the radius of thawed zone is less than in the previous example and for both mass flow rates does not exceed 1 m (Fig. 5a and Fig. 5b).

Now turn to the Otradninskoe gas field which has much lower (close to hydrate equilibrium temperature) reservoir temperature than the Middle-Viluy gas field. The calculations show that if initially a well was free from hydrate than at mass flow rate 2.86 kg/s it will be completely plugged in 4.5 hours (Fig. 6a). The radius of thawed zone will reach approximately 0.15 m (Fig. 6b).

Conclusions

The results of the numerical experiment lead to the following conclusions. 1) The problems of temperature regime and hydrate formation in gas wells are in general conjugated ones. Simplified models where rock temperature does not change with time lead to substantial underestimation such key parameter as duration of plug formation. It has been shown that for deep wells with reservoir temperature considerably higher than hydrate formation one this underestimation may be multiple. 2) Radius of thawed zone around wells indirectly depends on mass flow rate because the latter causes the duration of thermal interaction between flowing gas and surrounding rocks. 3) Deep wells with reservoir temperature approximately equal to hydrate formation one may be plugged in 4-5 hours. It means that the duration of thermal interaction of gas with rocks is relatively short and, therefore all technological parameters of gas production can be calculated in a framework of non-conjugated model.

REFERENCES

- [1] Bondarev E. A., Vasil'ev V. I., Voevodin A. F. et al. Thermohydrodynamics of gas production and transportation systems [in Russian]. Novosibirsk: Nauka, 1988.
- [2] Argunova K. K., Bondarev E. A., Rozhin I. I. The characteristics of the real gas and its analytical representation [in Russian]. Gas Chemistry 6 (2010) 52-54.
- [3] Latonov V. V., Gurevich G. R. Calculation of the compressibility coefficient of natural gases [in Russian], Gas Industry 2 (1969) 7-9.
- [4] Kay W. B. Density of hydrocarbon gases and vapors at high temperature and pressures. Ind. Eng. Chem. Res. 28 (1936) 1014-1019.
- [5] Sloan E. D. Clathrate hydrates of natural gases. 3d ed., New York: Marcel Dekker, 1998.
- [6] Isaev S. I., Kozhanov I. A., Kofanov V. I. et al. Theory of heat and mass transfer [in Russian]. In: A. I. Leont'ev (Ed.), Moscow: Vyschaya shkola, 1979.
- [7] Tikhonov A. N., Samarsii A. A. Equations of Mathematical Physics [in Russian]. Moscow: Nauka, 1977.
- [8] Samarskii A. A., Moiseenko B. D. Economical scheme of through calculation for multidimensional Stefan problems [in Russian]. Zh. Vych. Math. and Math. Fiz. 5, No. 5 (1965) 816-827.
- [9] Budak B. M., Solov'eva E. N., Uspenskii A. B. Difference method with smoothing coefficients for solving the Stefan problem [in Russian]. Zh. Vych. Math. and Math. Fiz. 5, No. 5 (1965) 828-840.

Fundamental problems of natural stratified medium wave dynamics: theory, measurements, applications

Bulatov V.V.¹, Vladimirov Yu.V.¹

¹*Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, Russia;*

bulatov@index-xx.ru

Abstract

In paper fundamental problems of internal gravity waves dynamics are considered. The solution of this problem is expressed in terms of the Green's function and the asymptotic representations of the solutions are considered. The uniform asymptotic forms of the internal gravity waves in horizontally inhomogeneous and non-stationary stratified ocean are obtained. A modified spatio-temporal ray method is proposed, which belongs to the class of geometrical optics methods (WKB method). Analytical and numerical algorithms of internal gravity wave calculations for the real ocean parameters are presented. Some results of internal gravity waves measurements in ocean and its interpretations are discussed.

Keywords: stratified medium, internal gravity waves, wave dynamics.

Acknowledgements: the presented results have been obtained by research performed under project supported by the Russian Foundation for Basic Research (No.14-01-00071, No.14-01-00466, No.14-08-00701), Program of the Russian Academy of Sciences "Fundamental Problems of Oceanology: Physics, Geology, Biology, Ecology".

Introduction

Now in connection with the new problems arising in geophysics, oceanology, physics of atmosphere, usage of the cryogenic fluid in the engineering sphere, as well as the problems of protection and study of the medium, operation of the complex hydraulic engineering facilities, including the marine oil producing complexes, and a number of other actual problems facing the science and engineering we can observe the growth of interest to the research of the wave dynamics of the different inhomogeneous fluids and, in particular, the natural stratified medium. This interest is caused not only by the practical needs, but also by the need to have the solid theoretical base to solve the arising problems. It is necessary to note, that solution of the problems of the mechanics of continua and hydrodynamics always served as the stimulus of new directions in mathematics and mathematical physics. As the illustration to the above may serve the stream of the new ideas in the theory of the nonlinear differential equations, and also the discovery of the startling dependencies between the can be appearing the different branches of mathematics, that has followed after exploration of Cartevaga de Vriza equation for the waves on the shallow water.

Certainly, for the detailed description of the big amount of the natural phenomena connected with the dynamics of the stratified non-uniform in the horizontal direction and the non-stationary mediums, it is necessary to use the sufficiently developed mathematical models, which as a rule are the rather complex nonlinear multi-parametric mathematical models and for their full-size research only the numerical methods are effective. However in some cases the initial qualitative idea of the amount of the studied phenomena one can receive on the basis of use of the more simple asymptotical models and the analytical methods of their research. It becomes evident, that in this respect the problems of the dynamics of the internal gravity waves in the non-uniform mediums are rather indicative. Even at the use of the linear models their solutions are rather specific and determine the independent mathematical interest alongside with the nontrivial physical corollaries.

Main results

The main fundamental problems of wave dynamics considered in the present paper were the following:

- construction of the exact and asymptotic solutions of the problem concerning the internal gravity waves excited by the non-local disturbing sources in the non-uniform stratified mediums, as well as development of the numerical algorithms for analysis of the corresponding spectral problems and for calculation of the wave disturbances for the real parameters of the vertically stratified mediums;

- research by means of the modified version of the space-time ray-tracing method (WKB method), evolution of the non-harmonic wave-trains of the internal gravity waves in the supposition of the slowness of variation of the parameters of the vertically stratified medium in the horizontal direction and in a time;

- the asymptotic analysis of the critical modes of generation and propagation of the internal gravity waves in the stratified mediums, including the study of the effects of the space-frequency screening;

- development of non-spectral methods of analysis of the in-situ measurements of the internal gravity waves for the purpose of the possible distant definition of the characteristics of the broad-band wave-trains, composing the measured hydrophysical fields, as well as the parameters of the ocean along a line of propagation of these wave-trains.

The paper presented methods and approaches of research of the internal gravity waves dynamics combine the comparative simplicity and computational capability to gain the analytical results, the possibility of their qualitative analysis and the accuracy of the numerical results. Besides that there is a possibility of inspection of the trustworthiness of the used hypotheses and approximations on the basis of analysis of the real oceanological data, while the exact analytical solutions for the model problems do not allow to apply the gained outcomes, for example, for analysis of the problem with

the real parameters of the medium, and the exact numeric calculation for one particular real medium does not give the possibility of the qualitative analysis of the medium with other real parameters. The results presented by the paper on the research of the dynamics of the non-harmonic wave-trains of the internal waves in the stratified mediums with the varying parameters enable analytically and numerically to examine effects of the special blocking, and also the excitation and failure of the separate frequency components of the propagating wave-trains.

It is necessary to mark once again, that in comparison with the majority of the researches devoted to study of the dynamics of the internal gravity waves, the methods of decomposing of the fields of the internal gravity waves into the certain benchmark functions enable to describe the main peculiarities of formation of the critical modes of generation and propagation of the non-harmonic wave-trains. It is expedient also to emphasize, that the built asymptotic representations in the form of the applicable model functions can be used also for study of any other wave processes (acoustical and seismic waves, SHF-irradiation, the tsunami waves, etc.) in the real mediums with a complex structure. All fundamental results of the paper are gained for the arbitrary distributions of the density and other parameters of the non-uniform media, and besides the main physical mechanisms of formation of the studied phenomena of the dynamics of the internal gravity waves in the non-uniform stratified mediums were considered in the context of the available data of the in-situ measurements.

The next step in the asymptotic study of the internal gravity waves should be study of the linear interaction of the wave-trains at their propagation as we used approximation of adiabatic, that is the independence of wave modes from each other. However, generally, the linear interaction (the linear conversion) of the waver modes is present. The phenomenon of the linear conversion of the internal gravity waves consists, that at the wave-trains passing through the non-uniform sections of the medium the amplitudes of the waves can vary non-adiabatically, that is the real amplitude-phase characteristics of the fields are varying differently, than it follows from the fundamental approximations of the geometrical optics used in this paper. The detailed study of these problems will be the subject of further researches.

Discussion and applications

The universal nature of the he asymptotic methods of research of the internal gravity waves offered in this paper is added with the universal heuristic requirements of the applicability of these methods. These criteria ensure the internal control of applicability of the used methods, and in some cases on the basis of the formulated criteria it is possible to evaluate the wave fields in the place, where the given methods are inapplicable. Thus there are the wide opportunities of analysis of the wave patterns as a whole, that is relevant both for the correct formulation of the analytical investigations, and for realization of estimate calculations at the in-situ measurements of the wave fields.

The special role of proposed methods is caused by that the parameters of the natural stratified mediums, as a rule, are known approximately, and efforts of the exact numerical solution of initial equations with usage of such parameters can lead to the overstatement of accuracy. Also popularity of the used approaches of analysis of dynamics of the internal gravity waves can be promoted just by the existence of the lot of the interesting physical problems quite adequately described by these approaches and can promote the interest to the multiplicity of problems bound to a diversification of the non-uniform stratified mediums. The value of such methods of analysis of the wave fields is determined not only by their obviousness, scalability and effectiveness at the solution of the different problems, but also that they can be some semi-empirical basis for other approximate methods in theory of propagation of the internal gravity waves.

Special interest to research of internal gravity waves is connected with also intensive exploitation of Arctic and its natural wealth. Internal gravity waves in Arctic are poorly studied as they move under ice and practically invisible from above, but accessible information about underwater objects movement show their existence. Sometimes there are exclusions when internal gravity waves reach ice and uplift and lower it with definite periodicity which can be fixed with the help of radiolocation sounding. Influence of all kinds of waves can be the reason of the ice cover split in the Arctic. Internal waves make for the movement of icebergs and different kinds of pollution. So, the research of wave dynamics in the region of the Arctic shelf is an important fundamental scientific and practical problem aimed at ensuring security while. Actual scientific problem is the study of the interaction of waves and ice cover in Arctic basin.

The obtained results relates to focuses described in American scientific environments. Office of Naval Research of U.S. Navy (ONR) has a renewed interest in understanding and predicting the environment in the Arctic, and the recent call "Emerging Dynamics of the Marginal Ice Zone" is a new research initiative with funds that has started from October 2011 and will last for five years. In particular the ONR has posed actual scientific fundamental questions: generation of internal gravity waves by the barotropic tide in Arctic basin; influence of the ice cover and its thickness on the generation and characteristics of internal gravity waves in the shelf zone; development of the theory of internal gravity waves to elaborate a reference wave in the Arctic basin needed to estimate the influence of waves on engineering constructions and oil platforms; transformation of intense internal waves in the Arctic basin with the account for the bottom topography and horizontal variability of the mean ocean state; estimates of the dynamics of bottom sediment transport influence by internal waves; modeling of lee waves in supercritical latitudes and internal waves in subcritical latitudes; conditions for existence of solitons (non-linear internal gravity waves) and their modeling in the Arctic basin; reflection of internal gravity waves from the shelf and verification of the solutions in the laboratory experiments; modeling of packets of internal waves in the conditions of the Arctic basin for remote study of the ocean properties; laboratory investigations of ice cover deformations induced by internal gravity waves of different origin; analysis of temperature and current measurements on the long-term moorings in

the Arctic basin over steep and flat topography.

Industrial activities on the continental and Arctic shelf connected with oil, gas, and other minerals extraction became one of the important reasons to begin researches of dynamic internal gravity waves. Ships and platforms busy with drilling and construction at the depth use long tubes joining them with the sea bottom. Builders of underwater constructions in equatorial districts experienced the influence of huge underwater internal waves and strong surface flows which can have the form of steep waterfalls. Some time ago when the phenomenon of internal waves and their strength were not known it happened that the builders lost their equipment. Such expensive losses made them think that security of underwater equipment and the influence of internal gravity waves should be controlled. The internal waves characteristics are used for appreciation of their influence on the environment and underwater platforms of oil and gas deposits at the shelf (Arctic basin, China and Yellow Seas, etc). Stationary tubes for oil and gas transportation stretch along the ocean shelf slope.

Internal waves play the role of transport moving biomass and nutrient matters from place to place. Gliding upwards along the shelf they bring nutrient matters from the depth to more salted shoal, where conditions for life of fries and larvae are ideal. The internal waves movement in this case can be compared with the work of a pump. There is an interesting connection between internal waves and the sea life. In slow and long vertical stream formed by these waves plankton and small sea organisms can live. Experiments show that sea organisms use such vertical streams. They can swim vertically against the current and grow and propagate at the same time. Such processes take place just along the vertical stream while moving of the wave and they are observed with the help of satellite. The results of this work represent a significant interest for physics, mathematics and engineers. Besides that interest analytical, asymptotic and numerical solutions, which were obtained in this paper, can present significant importance for engineering applications, since presented method which were to calculate the internal gravity waves field, make it possible to calculate different wave fields in the rather big class of another problems.

REFERENCES

- [1] Bulatov V.V., Vladimirov Yu.V. Internal gravity waves: theory and applications. Moscow: Nauka Publishers, 2007.
- [2] Bulatov V.V., Vladimirov Yu.V. Wave dynamics of stratified mediums. Moscow: Nauka Publishers, 2012.
- [3] Bulatov V.V., Vladimirov Yu.V. Fundamental problems of internal gravity waves dynamics in ocean. J. Basic & Applied Sciences, V. 9, P. 69-81, 2013.
- [4] Bulatov V.V., Vladimirov Yu.V. The dynamics of internal gravity waves in the ocean: theory and applications, 2013. <http://arxiv.org/abs/1308.3718>

Pre- and Post-Processing for Effective Finite Element Error Control in the Poisson and the Obstacle Problem

C. Carstensen¹, C. Merdon²

¹*Humboldt-Universität zu Berlin, Berlin, Germany;*

cc@math.hu-berlin.de

²*Weierstrass-Institut, Berlin, Germany;*

Christian.Merdon@wias-berlin.de

Abstract

Guaranteed error control is an eminent must whenever numerical algorithms are employed for a reliable computational forecast. The discretisation error control is of particular importance in computational PDEs for it cannot be avoided and its control is much more involved than any other algorithmical error source once the mathematical model and the coefficients are fixed. The typical discretization of the weak form of a well-posed boundary value problem with an elliptic PDE leads to computable residuals and their dual norms (i.e. in operator norm). This residual norm is equivalent to the error in some Sobolev norm but involves some maximization problem which needs to be evaluated with small computational costs. The equilibration techniques of Braess or Luce-Wohlmuth have recently be post-processed in [Carstensen-Merdon, Numer. Math., 2013, pp. 425–459]. This work describes this optimal post-processing and adds some pre-processing to reduce the data oscillation terms significantly and thereby leads to the best-known efficiency indices for a Poisson model problem and some obstacle problem as small as 1.03 and 1.14.

Keywords: adaptive finite element methods, a posteriori error estimators, guaranteed upper error bounds, equilibration error estimators, obstacle problems

Introduction

The first attempts in the a posteriori error control have led to the books [1, 2, 17, 23] and the older computational survey papers [3, 14, 15]. The a posteriori error control for second-order elliptic boundary value problems involves residuals of the form

$$\text{Res}(v) = \int_{\Omega} (fv - \sigma_h \cdot \nabla v) dx \quad \text{for } v \in V := H_0^1(\Omega) \quad (1)$$

with some given Lebesgue integrable function f and some given discrete flux σ_h [7, 8]. For instance, in the scenario of a finite element best approximation $u_h \in V(\mathcal{T}) \subseteq V$ for the exact solution of the Poisson model problem, $u \in V$ with $f + \Delta u = 0$, the discrete stress $\sigma_h = \nabla u_h$ satisfies $\text{Res}(V(\mathcal{T})) = 0$.

The dual norm of the residual with respect to some energy norm $\|\cdot\|$, e.g. $\|\cdot\| := \|\nabla\cdot\|_{L^2(\Omega)}$ for the Poisson model problem reads

$$\|\text{Res}\|_{\star} := \sup_{v \in V \setminus \{0\}} \text{Res}(v) / \|v\|.$$

In the Poisson model problem, it holds $\|\text{Res}\|_{\star} = \|u - u_h\|$. Hence, guaranteed upper bounds for $\|\text{Res}\|_{\star}$ imply guaranteed error bounds, or error majorants in the sense of Repin [23], for the energy error $\|u - u_h\|$. Similar scenarios with two residuals arise for nonconforming finite element approximations [9, 12]. The guaranteed error control for obstacle problems after [4] also involves the residual of an auxiliary Poisson problem and its dual norm, see Section for details.

Section summarises techniques and recent advances from the numerical surveys [3, 14, 10] to compute such guaranteed upper bounds via the design of equilibrated quantities $q \in H(\text{div}, \Omega)$ such that, by a triangle inequality,

$$\|\text{Res}\|_{\star} \leq \|f + \text{div } q\|_{\star} + \|\text{div}(q - \sigma_h)\|_{\star}.$$

The second term is often estimated suboptimally as $\|\text{div}(q - \sigma_h)\|_{\star} \leq \|q - \sigma_h\|_{L^2(\Omega)}$, while a new generation of equilibration error estimators approximates

$$\|\text{div}(q - \sigma_h)\|_{\star} = \min_{v \in H^1(\Omega)} \|q - \sigma_h - \text{Curl } v\|_{L^2(\Omega)}.$$

The novel post-processing from [10] explained in Section computes some discrete $\text{Curl } v_h$ and improves the efficiency at almost no extra costs. The term $\|f + \text{div } q\|_{\star}$ leads to oscillations or other higher-order terms, but may have a large impact on coarse grids with rough data. A new pre-processing (called step 1 in Section) heals this shortcoming.

Section reports on the superiority of those error estimates with an application to the lowest-order conforming finite element method for the Poisson model problem. Section applies the post-processing to equilibration error estimators for energy error control for conforming obstacle problems.

Equilibration Error Estimators

Let \mathcal{T} denote a regular triangulation of the bounded simply-connected polygonal Lipschitz domain $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ into triangles with nodes \mathcal{N} and nodal basis functions φ_z for every $z \in \mathcal{N}$. The intersection $V(\mathcal{T}) := P_1(\mathcal{T}) \cap V$ between the piecewise linear polynomials $P_1(\mathcal{T})$ and V denotes the space of discrete test functions and is spanned by the nodal basis functions φ_z of the free nodes $z \in \mathcal{N}(\Omega)$.

Consider some residual of the form (1) with source function $f \in L^2(\Omega)$ and a piecewise constant discrete flux $\sigma_h \in P_0(\mathcal{T}; \mathbb{R}^2)$ such that $\text{Res}(\varphi_z) = 0$ for all $z \in \mathcal{N}(\Omega)$. Equilibration error estimators design some quantity $q \in H(\text{div}, \Omega)$ such that $\|f + \text{div } q\|_{\star}$ is of higher order and

$$\|\text{Res}\|_{\star} \leq \|f + \text{div } q\|_{\star} + \|\text{div}(\sigma_h - q)\|_{\star}.$$

Two examples for such a design are given through the Braess equilibration error estimator [6, 5] and the Luce-Wohlmuth error estimator [20, 10] which solve at most one-dimensional linear systems of equations around each node $z \in \mathcal{N}$ and design some Raviart-Thomas function $q_B \in \text{RT}_0(\mathcal{T})$ and $q_{\text{LW}} \in \text{RT}_0(\mathcal{T}^*)$ on the dual triangulation \mathcal{T}^* . The dual mesh \mathcal{T}^* divides every triangle $T \in \mathcal{T}$ into six subtriangles of same area by connection of the center of inertia $\text{mid}(T)$ with the three vertices and the three edge midpoints of T . This results in the two guaranteed upper bounds

$$\eta_B := \|h_{\mathcal{T}}(f - f_{\mathcal{T}})\|_{L^2(\Omega)} / j_{1,1} + \|\sigma_h - q_B\|_{L^2(\Omega)}, \quad (2)$$

$$\eta_{\text{LW}} := \|h_{\mathcal{T}}(f - f^*)\|_{L^2(\Omega)} / j_{1,1} + \|\sigma_h - q_{\text{LW}}\|_{L^2(\Omega)} \quad (3)$$

for the piecewise integral mean $f_{\mathcal{T}} \in P_0(\mathcal{T})$, i.e., $f_{\mathcal{T}}|_T := \int_T f dx$ for $T \in \mathcal{T}$ and $f^* \in P_0(\mathcal{T}^*)$ with $f^*|_{T^*} := 3 \int_{T^*} f \varphi_z dx$ on the two subtriangles $T^* \in \mathcal{T}^*(z)$ of $T \in \mathcal{T}(z)$. The function f^* is our preferred approximation of f in the Luce-Wohlmuth design [10, 16] that allows this very easy estimation of $\|f - f^*\|_{\star}$. The number $j_{1,1} \geq 3.8317$ is the first positive root of the first Bessel function J_1 from the Poincaré constant [19].

Post-processing

The post-processing of q_B or q_{LW} consists of two steps [21, 10] and involves a refined triangulation $\hat{\mathcal{T}} := \text{red}(\mathcal{T})$ or $\hat{\mathcal{T}} := \text{red}^2(\mathcal{T})$ for η_B and $\hat{\mathcal{T}} := \mathcal{T}^*$ for η_{LW} . A red-refinement $\text{red}(\mathcal{T})$ of \mathcal{T} connects the three edge midpoints in every triangle and so divides it into four triangles with same area.

The first step of the post-processing projects $q_B \in \text{RT}_0(\mathcal{T})$ or $q_{\text{LW}} \in \text{RT}_0(\mathcal{T}^*)$ onto $\hat{q} \in \text{RT}_0(\hat{\mathcal{T}})$ with $\text{div } \hat{q} + f_{\hat{\mathcal{T}}}$ to allow the better estimate

$$\|f + \text{div } \hat{q}\|_{\star} \leq \|h_{\hat{\mathcal{T}}}(f - f_{\hat{\mathcal{T}}})\|_{L^2(\Omega)} / j_{1,1} =: \text{osc}(f, \hat{\mathcal{T}}) / j_{1,1} \leq \text{osc}(f, \mathcal{T}) / j_{1,1}.$$

This projection is performed locally on every subtriangulation $\hat{\mathcal{T}}(T)$ of $T \in \mathcal{T}$ through $(q - \hat{q}) \cdot \nu_T = 0$ along ∂T . The first step is optional and if it is performed, the letter ‘m’ is added to the label of the refined error estimator; further details on this step are in [21].

The second step from [10] employs the identity

$$\|\text{div}(\hat{q} - \sigma_h)\|_{\star} = \min_{\gamma \in H^1(\Omega)} \|\hat{q} - \sigma_h - \text{Curl } \gamma\|_{L^2(\Omega)}$$

and designs some piecewise affine $\gamma_h \in P_1(\hat{\mathcal{T}}) \cap C(\Omega)$ that is cheap to compute and leads to sharper estimates. The computation runs some simple pre-conditioned conjugate gradient (pcg) scheme with k iterations and Jacobi pre-conditioner. The case $k = \infty$ denotes an exact solve and leads to the best possible $\gamma_h \in P_1(\hat{\mathcal{T}}) \cap C(\Omega)$. Further details on the second step are in [10].

In the numerical examples below, the number of cg iterations of the post-processing is added to the label in brackets. Every additional ‘r’ in front of this number is related

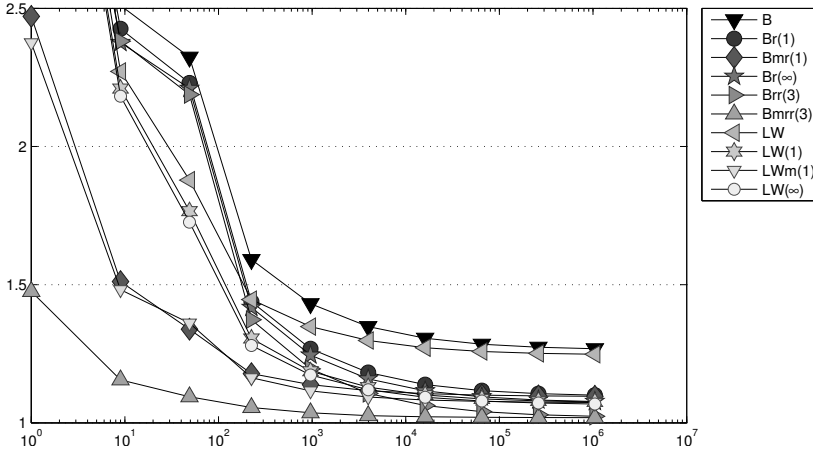


Fig. 1: History of efficiency indices $\eta_{xyz} / |||u - u_h|||$ of various error estimators η_{xyz} labelled xyz as functions of the number of degrees of freedom on uniform meshes.

to one red-refinement. For example, the error estimator $\eta_{Bmrr(3)}$ is the post-processed η_B on two red-refinements with 3 pcg iterations, including the projection of the first post-processing step as indicated by ‘m’.

Numerical Example

Consider the square domain $\Omega := (0, 1)^2$ with the exact solution

$$u(x, y) = x(x - 1)y(y - 1) \exp(-100(x - 1/2)^2 - 100(y - 117/1000)^2) \in H_0^1(\Omega)$$

of the Poisson model problem for the right-hand side $f = -\Delta u$ with homogeneous boundary conditions. The source term causes big oscillations $\text{osc}(f, \mathcal{T})$ on coarse triangulations and demonstrates the relevance of the first step of the post-processing.

Figures 1 and 2 display the efficiency indices for uniform and adaptive mesh refinement. On coarse meshes, the oscillations dominate the guaranteed upper bounds and cause large efficiency indices above 2.5 for the equilibration error estimators η_B and η_{LW} but also for all post-processed error estimators without divergence correction. In contrast to this, the post-processed error estimators with the coupled divergence correction $\eta_{Bmr(1)}$ and $\eta_{LWm(1)}$ are less affected and $\eta_{Bmrr(3)}$ leads to efficiency indices below 1.5 even on the very coarse initial triangulation. On the finer meshes, the second step of the post-processing becomes more effective. While the not post-processed error estimators η_B and η_{LW} assume efficiency indices around 1.3, their post-processed companions are significantly sharper error estimators. The asymptotic efficiency indices of $\eta_{Bmrr(3)}$ are indeed as small as 1.03.

The adaptive meshes were generated by red-green-blue refinement and Dorfler marking with bulk parameter $\theta = 1/2$ after [13] based on the explicit refinement

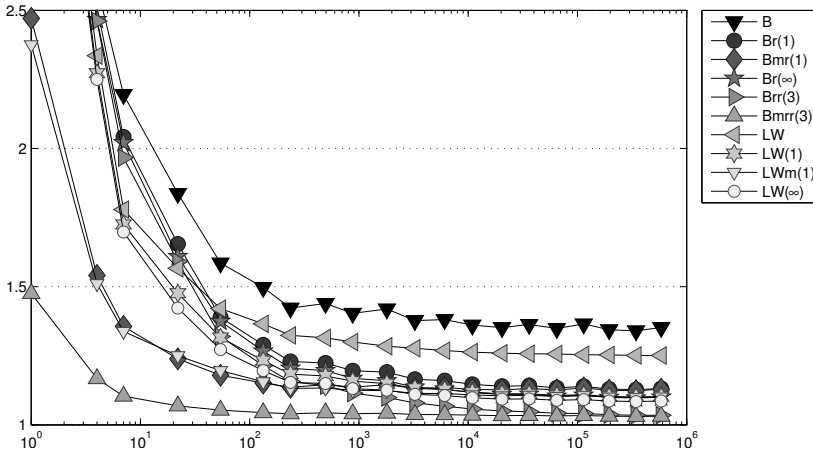


Fig. 2: History of efficiency indices $\eta_{xyz} / \|u - u_h\|$ of various error estimators η_{xyz} labelled xyz as functions of the number of degrees of freedom on adaptive meshes.

indicators $\eta(T)^2 := |T| \|f\|_{L^2(T)}^2 + |T|^{1/2} \|[\sigma_h \cdot \nu_T]\|_{L^2(\partial T)}^2$. The adaptive mesh refinement leads to a smaller pre-asymptotic range and to optimal convergence rates [24]. The uniform meshes are consecutive red-refinements of an initial triangulation \mathcal{T}_0 . Since in this example the exact solution is known, the exact error can be computed exactly (up to quadrature errors). However, in other benchmark examples, also with unknown exact solutions, the results concerning efficiency indices and convergence rates are just as pleasant [10, 12].

Conforming Obstacle Problems

This section deals with energy error control for obstacle problems.

Mathematical Model

The unique exact weak solution $u \in K$ of the obstacle problem with obstacle $\chi \in H^2(\Omega)$ with $\chi \leq 0$ inside the closed and convex set of admissible functions

$$K := \{v \in H^1(\Omega) \mid v = 0 \text{ on } \partial\Omega \text{ and } \chi \leq v \text{ a.e. in } \Omega\} \neq \emptyset,$$

is the unique solution $u \in K$ of the variational inequality

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla(u - v) \, dx \leq \int_{\Omega} f(u - v) \, dx \text{ for all } v \in K. \tag{4}$$

The existence and uniqueness as well as the higher regularity can be found in [18].

Error Control via Auxiliary Residual

After [4] and with a particular choice of the discrete Lagrange multiplier Λ_h of [11] and the nodal interpolation χ_h of χ , the discrete solution of the obstacle problem u_h in

$$K(\mathcal{T}) := \{v_h \in P_1(\mathcal{T}) \cap C(\Omega) \mid v_h = 0 \text{ on } \Gamma_D \text{ and } \chi_h \leq v_h \text{ in } \Omega\}$$

also solves the discrete version of the auxiliary Poisson problem for $w \in V$ with

$$\int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla v \, dx = \int_{\Omega} (f - \Lambda_h)v \, dx \quad \text{for all } v \in V. \quad (5)$$

The associated residual reads

$$\text{Res}_{\text{aux}}(v) := \int_{\Omega} (f - \Lambda_h)v \, dx - \int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v \, dx \quad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega).$$

The energy norm difference $\|w - u_h\| = \|\text{Res}_{\text{aux}}\|_{\star}$ between u_h and the exact solution w of the Poisson problem (5) can be estimated by any known a posteriori error estimator η . In the conforming case $\chi \leq \chi_h$, [11] leads to the guaranteed global upper bound

$$\begin{aligned} \|e\| \leq \text{GUB}(\eta) &:= (\eta + \|\Lambda_h - J\Lambda_h\|_{\star})/2 + \\ &+ \sqrt{\int_{\Omega} (\chi - u_h)J\Lambda_h \, dx + (\eta + \|\Lambda_h - J\Lambda_h\|_{\star})^2}. \end{aligned}$$

The patchwise oscillations $\text{osc}(\Lambda_h, \mathcal{N}) := \left(\sum_{z \in \mathcal{N}} h_z^2 \min_{f_z \in \mathbb{R}} \|\Lambda_h - f_z\|_{L^2(\omega_z)}^2 \right)^{1/2}$ are a computable bound for

$$\|\Lambda_h - J\Lambda_h\|_{\star} := \sup_{v \in V \setminus \{0\}} \int_{\Omega} (\Lambda_h - J\Lambda_h)v \, dx / \|v\| \leq C \text{osc}(\Lambda_h, \mathcal{N}).$$

The constant $C = \sqrt{3} \max_{z \in \mathcal{N}} C_P(\omega_z)$ involves the Poincaré constant on ω_z [21].

Numerical Example

The benchmark from [22] involves the constant obstacle $\chi = \chi_h \equiv 0$ on the square domain $\Omega = (-1, 1)^2$ with smooth inhomogeneous Dirichlet data $u_D(r, \varphi) = r^2 - 0.49$ (in terms of polar coordinates (r, φ) at 0) and right-hand side

$$f(r, \varphi) = \begin{cases} -16r^2 + 3.92 & \text{for } r > 0.7, \\ -5.8408 + 3.92r^2 & \text{for } r \leq 0.7. \end{cases}$$

The exact solution

$$u(r, \varphi) = \max\{0, r^2 - 0.49\}^2$$

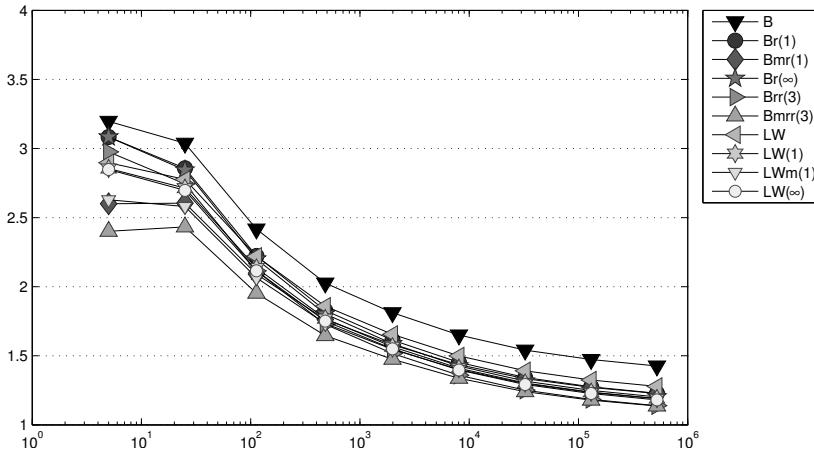


Fig. 3: History of efficiency indices $\eta_{xyz}/\|u - u_h\|$ of various error estimators η_{xyz} labelled xyz as functions of the number of degrees of freedom on uniform meshes.

touches the obstacle outside the circle with radius 0.7. Due to the inhomogeneous boundary data, the additional term $0.498 \left\| h_{\mathcal{E}}^{3/2} \partial^2 u_D / \partial s^2 \right\|_{L^2(\partial\Omega)}$ enters the guaranteed upper bound $GUB(\eta_{xyz})$ where $h_{\mathcal{E}}$ denotes the local edge-length of the edges along the Dirichlet boundary [11, 21]. Since the exact solution is known, the exact energy error can be computed exactly (up to quadrature errors).

Figures 3 and 4 compare the efficiency indices $GUB(\eta_{xyz})/\|e\|$ of the global upper bounds $GUB(\eta_{xyz})$. The efficiency indices start between 2.4 and 3.5 on coarse meshes but decrease slowly to values between 1.0 and 1.5 on the finer meshes. This is due to the decrease of the extra terms and increasing influence of η_{xyz} . As a consequence, there is a significant impact of the accuracy of η_{xyz} on the efficiency of the global upper bound $GUB(\eta_{xyz})$. Also in this example the best error estimator is $\eta_{[mrr(3)]}$, that attains efficiency indices below 1.14 on the finest uniform mesh and also yields better efficiency indices on coarse meshes due to the mean correction and the post-processing.

The adaptive meshes were generated by red-green-blue refinement and Dörfler marking with bulk parameter $\theta = 1/2$ after [13] based on the refinement indicator

$$\begin{aligned} \eta(T)^2 := & |T| \|f - \Lambda_h\|_{L^2(T)}^2 + |T|^{1/2} \|[\sigma_h \cdot \nu_T]\|_{L^2(\partial T)}^2 + \int_T (\chi - u_h) J \Lambda_h \, dx \\ & + \sum_{z \in \mathcal{N}(T)} \|\varphi_z(\Lambda_h - (\Lambda_h)_{\omega_z})\|_{L^2(\omega_z)} / 3 + 0.248 \left\| h_{\mathcal{E}}^{3/2} \partial^2 u_D / \partial s^2 \right\|_{L^2(\partial T \cap \partial\Omega)}^2. \end{aligned}$$

The uniform meshes are consecutive red-refinements of an initial triangulation \mathcal{T}_0 . The adaptive mesh refinement leads to seemingly optimal convergence rates. Other examples benchmark examples with affine obstacles in [11] show similar results. The same reference also discusses problems with non-affine obstacle where $GUB(\eta_{xyz})$ is

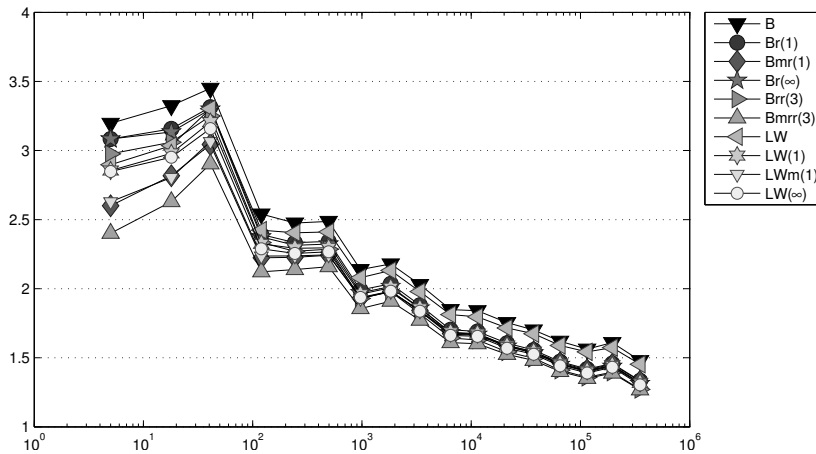


Fig. 4: History of efficiency indices $\eta_{xyz}/\|u - u_h\|$ of various error estimators η_{xyz} labelled xyz as functions of the number of degrees of freedom on adaptive meshes.

still a reliable guaranteed upper bound, but not as efficient as in the affine examples.

REFERENCES

- [1] M. Ainsworth and J. T. Oden. *A posteriori error estimation in finite element analysis*. Pure and Applied Mathematics (New York). Wiley-Interscience [John Wiley & Sons], New York, 2000.
- [2] I. Babuška and T. Strouboulis. *The finite element method and its reliability*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. The Clarendon Press Oxford University Press, New York, 2001.
- [3] S. Bartels, C. Carstensen, and R. Klose. An experimental survey of a posteriori Courant finite element error control for the Poisson equation. *Adv. Comput. Math.*, 15(1-4):79–106, 2001.
- [4] Dietrich Braess. A posteriori error estimators for obstacle problems—another look. *Numer. Math.*, 101(3):415–421, 2005.
- [5] Dietrich Braess. *Finite elements*. Cambridge University Press, Cambridge, third edition, 2007. Theory, fast solvers, and applications in elasticity theory.
- [6] Dietrich Braess and Joachim Schöberl. Equilibrated residual error estimator for edge elements. *Math. Comp.*, 77(262):651–672, 2008.
- [7] C. Carstensen. A unifying theory of a posteriori finite element error control. *Numer. Math.*, 100(4):617–637, 2005.

- [8] C. Carstensen, M. Eigel, R. H. W. Hoppe, and C. Loebhard. Numerical mathematics: Theory, methods and applications. *Numer. Math. Theor. Meth. Appl.*, 5(4):509–558, 2012.
- [9] C. Carstensen and C. Merdon. Computational survey on a posteriori error estimators for nonconforming finite element methods for Poisson problems. *J. Comput. Appl. Math*, 2013.
- [10] C. Carstensen and C. Merdon. Effective postprocessing for equilibration a posteriori error estimators. *Numer. Math.*, 123(3):425–459, 2013.
- [11] C. Carstensen and C. Merdon. A posteriori error estimator competition for conforming obstacle problems. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 29(2):667–692, 2013.
- [12] C. Carstensen, C. Merdon, and J. Neumann. Aspects of guaranteed error control in cpde, proceedings paper for the symposium in honor of Raytcho Lazarov’s 40 years research in computational methods and applied mathematics 2013. 45:103–119, 2013.
- [13] Carsten Carstensen. An adaptive mesh-refining algorithm allowing for an H^1 stable L^2 projection onto Courant finite element spaces. *Constr. Approx.*, 20(4):549–564, 2004.
- [14] Carsten Carstensen and Christian Merdon. Estimator competition for Poisson problems. *J. Comp. Math.*, 28(3):309–330 (electronic), 2010.
- [15] Carsten Carstensen and Christian Merdon. Remarks on the state of the art of a posteriori error control of elliptic PDEs in energy norms in practise. *Stud. Univ. Babeş-Bolyai Math.*, 56(2):273–293, 2011.
- [16] Carsten Carstensen and Christian Merdon. Refined fully explicit a posteriori residual-based error control (submitted). 2013+.
- [17] W. Han. *A posteriori error analysis via duality theory*, volume 8 of *Advances in Mechanics and Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 2005.
- [18] David Kinderlehrer and Guido Stampacchia. *An introduction to variational inequalities and their applications*, volume 88 of *Pure and Applied Mathematics*. Academic Press Inc. [Harcourt Brace Jovanovich Publishers], New York, 1980.
- [19] R. S. Laugesen and B. A. Siudeja. Minimizing Neumann fundamental tones of triangles: an optimal Poincaré inequality. *J. Differential Equations*, 249(1):118–135, 2010.
- [20] R. Luce and B. I. Wohlmuth. A local a posteriori error estimator based on equilibrated fluxes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 42(4):1394–1414, 2004.

- [21] C. Merdon. *Aspects of guaranteed error control in computations for partial differential equations*. PhD thesis, 2013, <http://edoc.hu-berlin.de/docviews/abstract.php?id=40295>.
- [22] Ricardo H. Nochetto, Kunibert G. Siebert, and Andreas Veerer. Pointwise a posteriori error control for elliptic obstacle problems. *Numer. Math.*, 95(1):163–195, 2003.
- [23] S. Repin. *A Posteriori Estimates for Partial Differential Equations*, volume 4 of *Radon Series on Computational and Applied Mathematics*. Walter de Gruyter, Berlin, 2008.
- [24] Rob Stevenson. Optimality of a standard adaptive finite element method. *Found. Comput. Math.*, 7(2):245–269, 2007.

Experimental evaluation of soil freezing-thawing PDE model using soil freezing characteristic curve

Cheng Q.¹, Sun Y.¹, Zhao Y.²

¹*College of Information and Electrical Engineering, China Agricultural University,
Beijing, China;*

davidcheng1025@163.com

pal@cau.edu.cn

²*School of Technology, Beijing Forestry University, Beijing, China;*

yandongzh@bjfu.edu.cn

Abstract

Many natural phenomena, such as seasonal soil frost penetrating into underground, are commonly modeled by PDEs with specific moving boundary conditions. For solving this type of PDE, the moving boundary conditions have to be treated overall the computing process. This paper focused on validating the couple-heat-water-transfer model using the experimental data determined in situ. Moreover, we proposed that soil freezing characteristic curve (SFCC) acted as the moving boundary condition and a novel dielectric sensor for determining the SFCC was used. The experiment was conducted at two fields (silt-loam and sand) in Jilin Province, the northeast of China. The SFCCs were determined at the depths of 10, 20, 30, 40, 50 and 60 cm, respectively. The good results confirmed that the in situ determined SFCCs can greatly benefit to the validations of the PDE models for characterizing soil freezing dynamics.

Keywords: soil freezing-thawing process, PDE model, soil freezing characteristic curve, Experimental evaluation.

Acknowledgements: this study is financially supported by the National Nature Science Foundation of China under Project No. 31171458, the Doctoral Promotion Fund of Educational Ministry of China project No. 20110008110046 and Chinese Universities Scientific Fund (China Agricultural University: 2012YJ117).

Introduction

The soil freezing-thawing process has attracted increasing concerns in agriculture, climate and hydrologic systems. To store more water in soils for crop growth, field irrigation in early winter should be conducted appropriately before the soil starts freezing. This is because the earlier irrigating would result in excessive infiltration to subsoil while the later would lead to surface runoff. Considering the conservations of mass and energy, accurate prediction of soil freezing-thawing process under different conditions (microclimates, soil properties and crop managements) will facilitate economical, ecological and effective practices aimed at sustainable development.

Soil is a three-phase material which is comprised of soil particles, liquid water and air. Different from the freezing and thawing processes in pure material, those in soil are accompanied with heat transfer, water flow and phase changes [1]. In recent decades, some researchers found that the soil freezing-thawing problem concerned with phase transition could be characterized by the moving boundary problem (Stefan problem) which occurred in many physical processes for describing heat transfer in a material with phase-change interface. With this intension, the traces of the frozen and thawed depth of soil were reduced to the Stefan problem [2, 3]. However, the classic Stefan problem can only be used in modeling the processes of crystallization of pure substances, which referred to a two-phase transition interface when using thermal diffusion model. On the other hand, soil is a three-phase material and presents a definite phase-change zone that water and ice coexist without temperature changing [4,5]. Moreover, in frozen region, even if the soil temperature is below the freezing point, liquid water, ice and soil matrices are in an equilibrium state. Meanwhile, the decrease of the amount of liquid water in frozen soil creates a water potential gradient in unfrozen soil favoring water movement toward the freezing front, when several critical parameters of soil, such as hydrological conductivity, thermal conductivity and latent heat, would vary accordingly as the liquid water content or temperature of soil changed [6-9]. For this, the soil freezing characteristic curve (SFCC) which reflects the change of soil physical properties in frozen soil is particularly important for validating the model. In this study, several experiments under different field conditions were conducted using a multi-sensor system for accurately acquiring liquid water content and temperature of soil profiles [10]. By means of the data recorded from sensors, the objectives of this study were (i) to estimate the soil physical parameters in frozen soil through the determined SFC under field condition; (ii) to validate the practical model for the prediction of soil freezing-thawing process in field management.

Materials and Method

Model Description

Generalized from the classic Stefan problem, the freezing-thawing PDE model in soil can be described as:

In frozen soil zone

$$C_f \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_f \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad Fdi(t) < z < Tdi(t) \quad (1)$$

In unfrozen soil zone

$$C_u \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_u \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad -L < z < Fdi(t), Tdi(t) < z < 0 \quad (2)$$

where t is time and z is the depth of the soil (positive upwards); $Fdi(t)$ and $Tdi(t)$ are the frost and thaw depths, respectively; C_f and C_u are volumetric soil heat capacities of frozen and unfrozen soils, respectively; λ_f and λ_u are soil thermal conductivities of frozen and unfrozen soils, respectively; T is soil temperature.

Based on the mass and energy balance equations and temperature continuity on both phase transition interfaces, the moving-boundary condition can be expressed as the following equations:

$$\begin{cases} Q \frac{dFdi(t)}{dt} = \lambda_f \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=Fdi(t)^+} - \lambda_u \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=Fdi(t)^-} \\ Q \frac{dTdi(t)}{dt} = \lambda_f \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=Tdi(t)^+} - \lambda_u \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=Tdi(t)^-} \end{cases} \quad (3)$$

The SFCC was used to describe the LSWC-T relation between $Fdi(t)^+$ ($Tdi(t)^+$) and $Fdi(t)^-$ ($Tdi(t)^-$), and can be expressed as:

$$\theta(T) = a(-T)^b \quad (4)$$

Where a and b are estimated through regression of determined SFCC. The initial conditions are as follows:

$$T|_{z=Fdi(t)^+} = T|_{z=Fdi(t)^-} = 0, \quad T|_{z=Tdi(t)^+} = T|_{z=Tdi(t)^-} = 0 \quad (5)$$

Multi-sensor system

The proposed multi-sensor system consists of a frequency domain (FD) sensor and a temperature sensor array. The FD probe lowered in PVC tubes was used for measuring LSWC of soil profiles. For each plot, five PVC access tubes (length: 200 cm) were inserted into the soil with 20 cm height above the ground. Considering the bottom of each tube which was sealed with a rubber stopper, the maximum observation depth was 160 cm. Thus, the FD probe can measure the LSWC of soil profile with an interval of 10 cm from 10 to 160 cm. Near to each tube, a sensor array with sixteen temperature sensors (DS18B20, accuracy: $0.5^\circ C$) was placed vertically in the soil profile in accordance with the measuring position of FD probe. There was a weather station providing local climate information for each plot.

Field experiment

The experiment was conducted at three agricultural fields in Lishu, Siping, Jilin Province, China. In this area, the long-term average of precipitation is 577.2 mm yr^{-1} and the annual average of temperature is $5.8^\circ C$. Two plots on the edge of three arable fields were chosen for observing LSWC and soil temperature. The soil textural compositions of the two plots are different as shown in Table 1. The spatial variability of soil textures at different plots and layers could extend the applicability of soil freezing-thawing model.

Table 1: The soil textural compositions of the two plots

| Plot | Depth | Sandy | Silt | Clay | Classification |
|--------|----------|-------|------|------|----------------|
| plot-1 | 0~80 cm | 0.22 | 0.64 | 0.14 | Silt loam |
| plot-2 | 0~110 cm | 0.96 | 0.04 | 0 | Sand |

A series of data were collected over the winter of 2011-2012. The data at the freezing period were used to determine the SFCC.

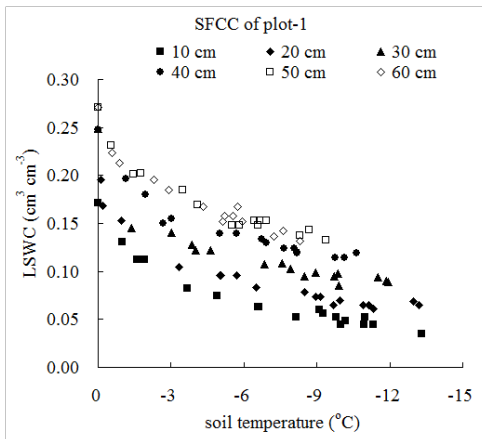
Results and discussion

Field determination of SFCCs

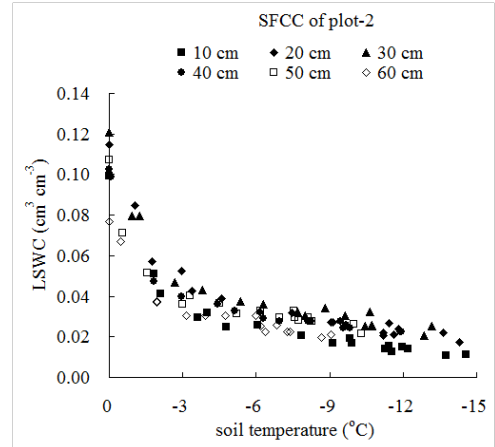
Fig. 1 shows the SFC curves determined at two plots during freezing period in the winter of 2011-2012. The SFC curves at plot-1 (Fig. 1a) have a transitional curve from 10 cm to 40 cm. This is due to the variations of bulk density of soil profile where the bulk density gradually increases from topsoil to subsoil. In comparison, the effect of bulk density is not significant at plot-2 (Fig. 1b). Based on the determined SFC and Eq. 4, the parameters can be estimated optimally and thus the predicted accuracy will be improved.

Model evaluation at two agricultural fields

Fig. 2 shows the upper-boundary conditions of soil temperature measured at the depth of 5 cm for each plot. It can be seen that the conditions of two plots were similar. Fig. 3 and Fig. 4 show the soil temperature determined and predicted using model simulation at the depth of 20, 40 and 60 cm for two plots. It can be seen that the simulated data are mostly in good agreement with the measured results. The freezing process can achieve better accuracy because the SFC was included in this process as a predetermined condition. The slight variation at each depth was due to the fitting error of SFC when using Eq. 4 to acquire a general curve. For the overestimate of simulated results in Fig. 3 after the soil was completely thawed, it could be originated from the fact that the water in soil moves from high to low water potential. After suffering a freezing-thawing process, the water can migrate from unfrozen soil to the frozen soil, which varies the soil properties such as thermal conductivity, heat capacity and water conductivity. In seasonal frozen soil zone, the water from deep soil migrates upward to the top soil, inducing the increase of heat capacity and water conductivity and the decline of thermal conductivity, which results in the overestimate of simulated data.



(a)



(b)

Fig. 1: SFC curves determined at two plots during freezing period

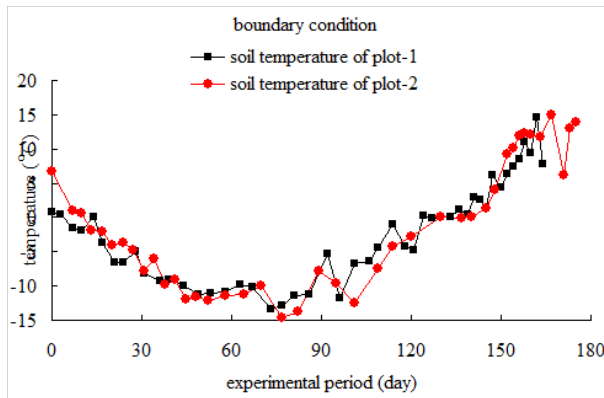
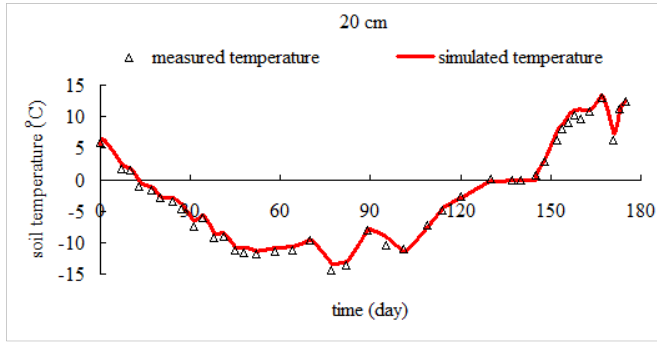
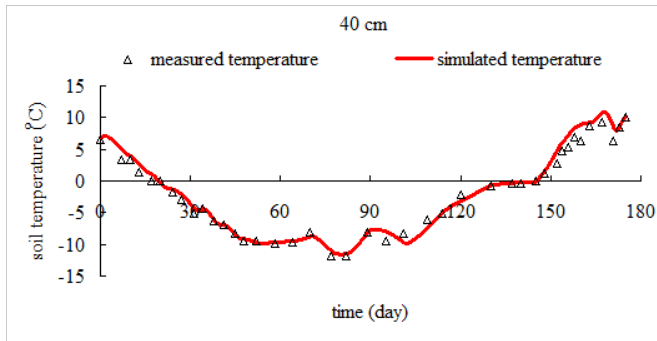


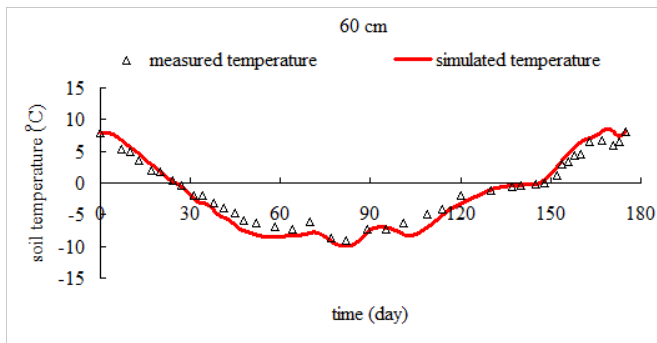
Fig. 2: Upper-boundary conditions of soil temperature measured at the depth of 5 cm



(a)

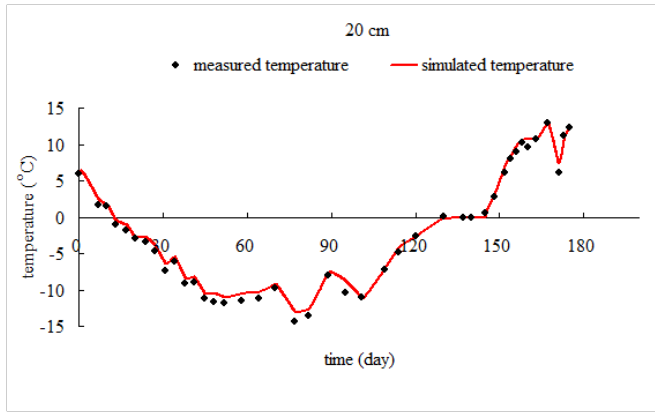


(b)

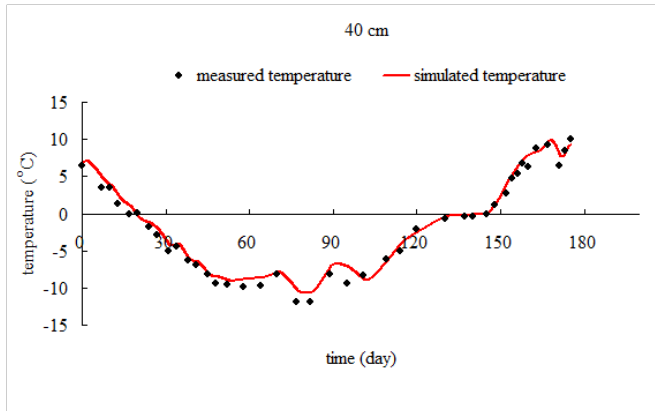


(c)

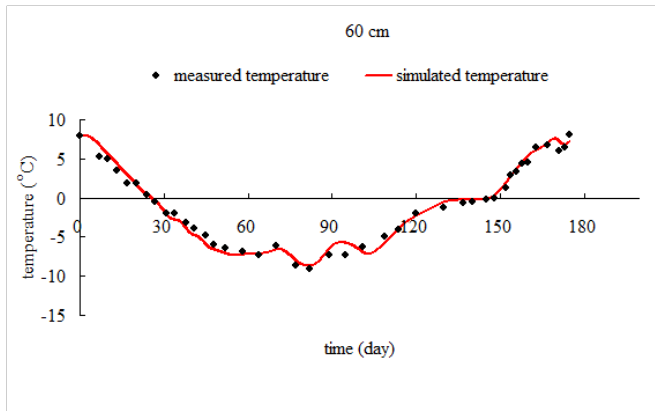
Fig. 3: The comparison between the soil temperature determined and predicted using model simulation at plot-1



(a)



(b)



(c)

Fig. 4: The comparison between the soil temperature determined and predicted using model simulation at plot-2

Conclusion

Our study demonstrated that the estimation of soil physical parameters using SFC curves was proved to be practical in the field. The numerical simulation of the tested model conforms to the measured data, indicating that the soil freezing-thawing model proposed in this study has relatively wide applicability under different field conditions. Moreover, if considering the effect of the water movement in the model, the accuracy will be improved. So far numerous models have been developed for describing the soil freezing-thawing process, methods to estimate more soil physical parameters in situ are also needed.

REFERENCES

- [1] *Dirksen, C. and Miller, R.D.*, 1966. Closed-system freezing of unsaturated soil. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 30(2): 168-173.
- [2] *Rodrigues, J.F., Urbano, J.M.*, 1999. On a Darcy-Stefan Problem arising in freezing and thawing of saturated porous media. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. 11(3), 181-191.
- [3] *Xie, Z., Song, L., Feng, X.*, 2008. A moving boundary problem derived from heat and water transfer processes in frozen and thawed soils and its numerical simulation. *Science in China Series A: Mathematics*. 51(8), 1510-1521.
- [4] *Maksimov A.M. and Tsytkin, G. G.* 1987 "Phenomenon of 'Overheating' and Formation of a Two-phase Zone in Phase Transitions in Frozen Soils," *Dokl. Akad. Nauk*, 294(5), 1117-1121.
- [5] *Vasilyev V.I. and Popov V.V.* , 2009. Numerical Solution of the Soil Freezing Problem. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2009, Vol. 1, No. 4, pp. 419-427.
- [6] *Williams, P.J.*, 1967. Experimental Determination of Apparent Specific Heats of Frozen Soils. *Norwegian Geotechnical Institute, Oslo*, No. 72, pp. I-10.
- [7] *Sawada, S. and Ohno, T.*, 1985. Laboratory studies on thermal conductivity of clay, silt and sand in frozen states. *Ground Freezing, International Symposium of Grand Freezing, Sapporo*, pp. 53-59.
- [8] *Ramos, M., Aguirre-Puente, J., Posado Cano, R.*, 1996. Soil freezing problem: an exact solution. *Soil Technology* 9, 29-38
- [9] *Hansson, K., J. Simunek, M. Mizoguchi, L. Lundin, M.T. van Genuchten* 2004. Water flow and heat transport in frozen soil: numerical solution and freeze/thaw applications. *Vadose Zone Journal*. 3:693-704.

- [10] Sun, Y., Q. Cheng, X. Xue, L. Fu, J. Chai, F. Meng, et al. 2012. Determining in-situ soil freeze–thaw cycle dynamics using an access tube-based dielectric sensor. *Geoderma* 189–190:321–327.

Reliable numerical models for parabolic problems

Istvan Farago

*Eotvos Lorand University and MTA-ELTE Numerical Analysis and Large Networks
Research Group, Budapest, Hungary;*
faragois@cs.elte.hu

Abstract

By constructing mathematical and numerical models in order to describe some real-life problem, we require that these models have different qualitative properties, which typically arise from some basic principles of the modelled phenomena. In this paper we investigate this question for continuous and discrete models. We give the conditions for the discretization parameters under which the qualitative properties are preserved.

Keywords: numerical modelling, monotone schemes, finite difference, finite element.

Acknowledgements: the work is supported by Hungarian National Research Fund OTKA No. K81403.

Introduction

When we construct mathematical and/or numerical models in order to model or solve a real-life problem, these models should have different qualitative properties, which typically arise from some basic principles of the modelled phenomena. E.g., many processes, varying in time, have such properties as monotonicity, non-negativity preservation and maximum principles. The discretization can qualitatively deform the mathematical models: certain qualitative properties which are inherent in the original real-life process are not preserved. Therefore, our goal is to guarantee quality preservation. It is almost obvious that the complexity of a model defines its tractableness: for structurally simple models, usually, it is easier to give qualitative characterization and/or define its solution. (For complex problems, in general, it is even impossible.) We note that the operator splitting method is a powerful tool to decompose a complex time-dependent problem into a sequence of simpler sub-problems, for which the required qualitative properties could be checked easier.

For some details and proofs we refer to the references [2] - [5].

Qualitative properties of the linear operators for the continuous models

Let Ω denote a bounded, simply connected domain in \mathbb{R}^d ($d \in \mathbb{N}^+$) with a Lipschitz-continuous boundary $\partial\Omega$. We introduce the sets

$$Q_\tau = \Omega \times (0, \tau), \quad \bar{Q}_\tau = \bar{\Omega} \times [0, \tau], \quad Q_\tau = \Omega \times (0, \tau], \quad \Gamma_\tau = (\partial\Omega \times [0, \tau]) \cup (\Omega \times \{0\})$$

for any arbitrary positive number τ . The set Γ_τ is usually called *parabolic boundary*. For some fixed number $T > 0$, we consider the linear partial differential operator

$$L \equiv \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{0 \leq |\zeta| \leq \delta} a_\zeta \frac{\partial^{|\zeta|}}{\partial^{\zeta_1} x_1 \dots \partial^{\zeta_d} x_d} \equiv \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{0 \leq |\zeta| \leq \delta} a_\zeta D^\zeta, \quad (1)$$

where δ is the order of the operator, ζ_1, \dots, ζ_d denote non-negative integers, $|\zeta|$ is defined as $|\zeta| = \zeta_1 + \dots + \zeta_d$ for the multi-index $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_d)$, and the coefficient functions $a_\zeta : Q_T \rightarrow \mathbb{R}$ are bounded and sufficiently smooth in the set Q_T .

Typically the function $v \in \text{dom } L$ describes the values of a physical quantity in the domain \bar{Q}_T , that is, the dependence of the quantity on place and time. The above mentioned physical property can be connected by the following definition.

Definition. Operator (1) is said to be *monotone* if for all $t^* \in (0, T)$ and $v_1, v_2 \in \text{dom } L$ such that $v_1|_{\Gamma_{t^*}} \geq v_2|_{\Gamma_{t^*}}$ and $(Lv_1)|_{Q_{t^*}} \geq (Lv_2)|_{Q_{t^*}}$, the relation $v_1|_{Q_{t^*}} \geq v_2|_{Q_{t^*}}$ holds.

Definition. The operator L is called *non-negativity preserving* (NP) when for any $v \in \text{dom } L$ and $t^* \in (0, T)$ such that $v|_{\Gamma_{t^*}} \geq 0$ and $(Lv)|_{Q_{t^*}} \geq 0$, the relation $v|_{Q_{t^*}} \geq 0$ holds.

Clearly, these properties of the linear operator (1) are equivalent.

Often we may need only certain characterization of v , which does not require the knowledge of v in the whole domain. From a practical point of view, only such estimates are suitable which include only the known input data. This kind of estimations is called *maximum-minimum principles*.

For the operators various maximum-minimum principles are defined and used in the literature, because they well characterize the operator L itself (cf. [1] and references therein). Now we list four possible variants of them.

We say that the operator L satisfies the *weak maximum-minimum principle* (WMP) if for any function $v \in \text{dom } L$ and any $t^* \in (0, T)$ the inequalities

$$\min\{0, \min_{\Gamma_{t^*}} v\} + t^* \min\{0, \inf_{Q_{t^*}} Lv\} \leq v(x, t) \leq \max\{0, \max_{\Gamma_{t^*}} v\} + t^* \max\{0, \sup_{Q_{t^*}} Lv\}$$

are valid for all $(x, t) \in \bar{Q}_{t^*}$. The operator L satisfies the *strong maximum-minimum principle* (SMP) if the inequalities

$$\min_{\Gamma_{t^*}} v + t^* \cdot \min\{0, \inf_{Q_{t^*}} Lv\} \leq \min_{Q_{t^*}} v \leq \max_{Q_{t^*}} v \leq \max_{\Gamma_{t^*}} v + t^* \cdot \max\{0, \sup_{Q_{t^*}} Lv\}$$

are satisfied.

When the sign of Lv is known, then it is possible that the estimates involve only the known values of v on the parabolic boundary. These types of maximum-minimum

principles are called *boundary maximum-minimum principles*, which are frequently used in proofs of the uniqueness theorems. We say that the operator L satisfies the *weak boundary maximum-minimum principle* (WBMP) if the inequalities $\min\{0, \min_{\Gamma_{t^*}} v\} \leq \min_{\bar{Q}_{t^*}} v \leq \max v \leq \max\{0, \max_{\Gamma_{t^*}} v\}$ hold. We say that the *strong boundary maximum-minimum principle* (SBMP) is true if for any function $v \in \text{dom } L$ and any $t^* \in (0, T)$ such that $Lv|_{\bar{Q}_{t^*}} \geq 0$, the relations $\min_{\Gamma_{t^*}} v = \min_{\bar{Q}_{t^*}} v \leq \max v = \max_{\Gamma_{t^*}} v$ hold.

The implications between the different qualitative properties are shown in Figure 1. (Here *cal1* denotes the constant 1 function, and the solid arrows mean unconditional implications while the dashed ones are true only under the indicated assumptions.) As one can easily observe, for $a_0 = 0$ the non-negativity property (NP) implies all the other properties.

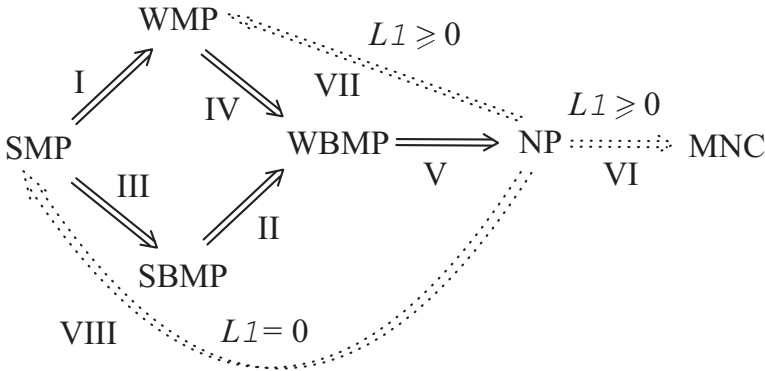


Fig. 1: Implications between the qualitative properties.

Discrete analogues of the qualitative properties - reliable discrete models

In this part we present the natural discrete analogs of the qualitative properties formulated in the previous section for the continuous models.

First, we introduce some notations.

Let us assume that the sets $\mathcal{P} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ and $\mathcal{P}_\partial = \{\mathbf{x}_{N+1}, \dots, \mathbf{x}_{N+N_\partial}\}$ consist of different vertices in Ω and on $\partial\Omega$, respectively. We set $\bar{N} = N + N_\partial$ and $\bar{\mathcal{P}} = \mathcal{P} \cup \mathcal{P}_\partial$. Let T and $\Delta t < T$ be two arbitrary positive numbers. Moreover, let us suppose that the integer M satisfies the condition $M\Delta t \leq T < (M + 1)\Delta t$ and introduce the set $\mathcal{R} = \{t_n = n\Delta t \mid n = 0, 1, \dots, M\}$. For any values τ from the set \mathcal{R} we introduce the notations

$$\mathcal{R}_\tau = \{t \in \mathcal{R} \mid 0 < t < \tau\}, \quad \mathcal{R}_{\bar{\tau}} = \{t \in \mathcal{R} \mid 0 < t \leq \tau\}, \quad \mathcal{R}_{\bar{\tau}}^0 = \{t \in \mathcal{R} \mid 0 \leq t \leq \tau\},$$

and the sets

$$\mathcal{Q}_\tau = \mathcal{P} \times \mathcal{R}_\tau, \quad \bar{\mathcal{Q}}_\tau = \bar{\mathcal{P}} \times \mathcal{R}_\tau^0, \quad \mathcal{Q}_{\bar{\tau}} = \mathcal{P} \times \mathcal{R}_{\bar{\tau}}, \quad \mathcal{G}_\tau = (\mathcal{P}_\partial \times \mathcal{R}_\tau^0) \cup (\mathcal{P} \times \{0\}).$$

Linear mappings that map from the space of real-valued functions defined on $\bar{\mathcal{Q}}_{t_M}$ to the space of real-valued functions defined on \mathcal{Q}_{t_M} are called *discrete (linear) mesh operators*. We define the qualitative properties of the discrete mesh operators in an analogous way to those in the linear partial differential operator case. For simplicity, we will formulate only one of them, which plays central role in our further investigations. (The ordering relations for vectors and matrices in the sequel are always meant elementwise.)

Definition. We say that the discrete mesh operator \mathcal{L} is *discrete non-negativity preserving* (DNP) if for any $\nu \in \text{dom } \mathcal{L}$ and any $t^* \in \mathcal{R}_{t_M}$ such that $\min_{\mathcal{G}_{t^*}} \nu \geq 0$ and $\mathcal{L}\nu|_{\mathcal{Q}_{t^*}} \geq 0$, the relation $\nu|_{\mathcal{Q}_{t^*}} \geq 0$ holds.

Let us introduce two special mesh functions, $\mathbb{1}$ and \mathbb{t} , defined on $\bar{\mathcal{Q}}_{t_M}$ with the following equalities: $\mathbb{1}(\mathbf{x}_i, t_n) = 1$, $\mathbb{t}(\mathbf{x}_i, t_n) = n\Delta t$ for all $(\mathbf{x}_i, t_n) \in \bar{\mathcal{Q}}_{t_M}$. (These mesh functions are the discrete analogue of the continuous functions $v(\mathbf{x}, t) = 1$ and $v(\mathbf{x}, t) = t$, respectively, associated with the mesh $\bar{\mathcal{Q}}_{t_M}$.) We will also use the notation m for the mesh function $(m)_i^n = n$. The implications between the different discrete qualitative properties are shown in Figure 2.

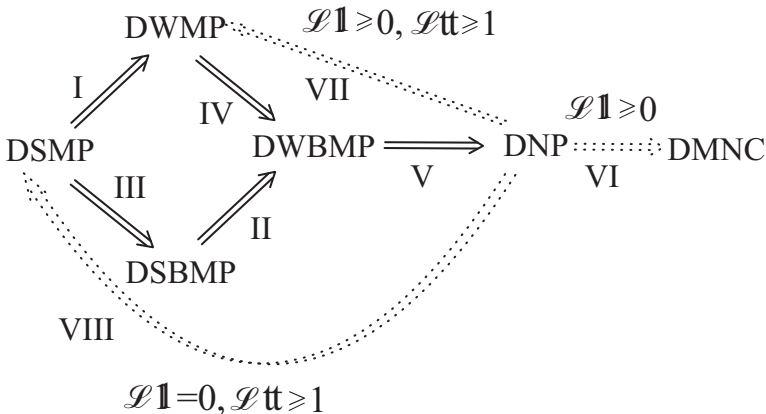


Fig. 2: Implications between the discrete qualitative properties.

From the illustrated implications we can directly observe the validity of the following statement.

Theorem 1. Under the conditions $\mathcal{L}\mathbb{1} = 0$ and $\mathcal{L}\mathbb{t} = 1$ the discrete non-negativity property (DNP) implies all the other properties.

Two-level discrete mesh operators

In the sequel, the values $\nu(\mathbf{x}_i, n\Delta t)$ of the function ν defined in $\bar{\mathcal{Q}}_{tM}$ will be denoted by ν_i^n . Similar notation is applied to the function $\mathcal{L}\nu$. We introduce the vectors

$$\nu^n = [\nu_1^n, \dots, \nu_{\bar{N}}^n], \quad \nu_0^n = [\nu_1^n, \dots, \nu_{\bar{N}}^n], \quad \nu_{\partial}^n = [\nu_{\bar{N}+1}^n, \dots, \nu_{\bar{N}}^n].$$

In many numerical methods, the discrete mesh operators have a special form, namely, they are defined as

$$(\mathcal{L}\nu)_i^n = (\mathbf{X}_1^{(n)}\nu^n - \mathbf{X}_2^{(n)}\nu^{n-1})_i, \quad i = 1, \dots, \bar{N}, \quad n = 1, \dots, M, \quad (2)$$

where $\mathbf{X}_1^{(n)}, \mathbf{X}_2^{(n)} \in \mathbb{R}^{N \times \bar{N}}$ are some given matrices. The term "two-level method" refers to the fact that two discrete time levels are involved into the definition of the mesh operator. Sometimes such a method is also called "one-step method". In order to give the connections between the qualitative properties of such a type of mesh operators, we reformulate the conditions in Theorem 1, see also Figure 2. We have already introduced the notation $\mathbf{e} = [1, \dots, 1] \in \mathbb{R}^{\bar{N}}$. The N -element and the $(\bar{N} - N)$ -element version of this vector will be denoted by \mathbf{e}_0 and \mathbf{e}_{∂} , respectively, i.e., $\mathbf{e} = [\mathbf{e}_0 | \mathbf{e}_{\partial}]$. Then the condition $\mathcal{L}\mathbb{1} = 0$ reads as

$$(\mathbf{X}_1^{(n)} - \mathbf{X}_2^{(n)})\mathbf{e} = \mathbf{0}$$

while the condition $\mathcal{L}\# \geq 1$ means that

$$\mathbf{X}_1^{(n)}(\Delta t n \mathbf{e}) - \mathbf{X}_2^{(n)}(\Delta t(n-1)\mathbf{e}) = \Delta t(n(\mathbf{X}_1^{(n)} - \mathbf{X}_2^{(n)})\mathbf{e} + \mathbf{X}_2^{(n)}\mathbf{e}) \geq \mathbf{e}_0.$$

If $(\mathbf{X}_1^{(n)} - \mathbf{X}_2^{(n)})\mathbf{e} = \mathbf{0}$ ($n = 1, \dots, M$), then the above condition reduces to $\Delta t \mathbf{X}_2^{(n)}\mathbf{e} \geq \mathbf{e}_0$. Since $\mathbf{X}_2^{(n)}\mathbf{e} = \mathbf{X}_1^{(n)}\mathbf{e}$, we have

Theorem 2. If a non-negativity preserving discrete mesh operator of type (2) has the properties

$$(\mathbf{X}_1^{(n)} - \mathbf{X}_2^{(n)})\mathbf{e} = \mathbf{0}, \quad \Delta t \mathbf{X}_1^{(n)}\mathbf{e} \geq \mathbf{e}_0 \quad \text{or} \quad \Delta t \mathbf{X}_2^{(n)}\mathbf{e} \geq \mathbf{e}_0, \quad (3)$$

then the operator possesses all the discrete qualitative properties.

How to guarantee the DNP property? To this aim, we introduce the following convenient partition of the matrices $\mathbf{X}_1^{(n)}$ and $\mathbf{X}_2^{(n)}$:

$$\mathbf{X}_1^{(n)} = [\mathbf{X}_{10}^{(n)} | \mathbf{X}_{1\partial}^{(n)}], \quad \mathbf{X}_2^{(n)} = [\mathbf{X}_{20}^{(n)} | \mathbf{X}_{2\partial}^{(n)}], \quad (4)$$

where $\mathbf{X}_{10}^{(n)}$ and $\mathbf{X}_{20}^{(n)}$ are square matrices from $\mathbb{R}^{N \times N}$, and $\mathbf{X}_{1\partial}^{(n)}, \mathbf{X}_{2\partial}^{(n)} \in \mathbb{R}^{N \times N_{\partial}}$.

Then the following statement is valid.

Theorem 3. Let us suppose that the matrices $\mathbf{X}_{10}^{(n)}$ ($n = 1, \dots, M$) of the discrete mesh operator \mathcal{L} defined in (2) are regular. Then \mathcal{L} possesses the discrete non-negativity preservation property if and only if the following relations hold for all $n = 1, \dots, M$,

$$(P1) (\mathbf{X}_{10}^{(n)})^{-1} \geq \mathbf{0},$$

$$(P2) -(\mathbf{X}_{10}^{(n)})^{-1} \mathbf{X}_{1\partial}^{(n)} \geq \mathbf{0},$$

$$(P3) (\mathbf{X}_{10}^{(n)})^{-1} \mathbf{X}_2^{(n)} \geq \mathbf{0}.$$

Hence, summarizing the results, we have

Theorem 4. Under the conditions (3) and (P1)-(P3) the mesh operator of type (2) has all discrete qualitative properties.

Qualitative properties of the discrete heat conduction mesh operator in the 1D

In this section we consider the one-dimensional heat conduction operator with a constant coefficient, which is assumed, for simplicity, to be equal to one, i.e.,

$$L \equiv \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (5)$$

On a fixed uniform mesh we consider the one-step discrete mesh operator \mathcal{L} , obtained by finite difference method and having the form (2)-(4) with $N_\partial = 2$, $\tilde{N} = N + 2$ and

$$\mathbf{X}_{10}^{(n)} = \text{tridiag} \left[-\frac{\theta}{h^2}, \frac{1}{\Delta t} + 2\frac{\theta}{h^2}, -\frac{\theta}{h^2} \right] \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

$$\mathbf{X}_{20}^{(n)} = \text{tridiag} \left[\frac{1-\theta}{h^2}, \frac{1}{\Delta t} - 2\frac{1-\theta}{h^2}, \frac{1-\theta}{h^2} \right] \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

$$\mathbf{X}_{1\partial}^{(n)} = -\frac{\theta}{h^2} \mathbf{E}; \quad \mathbf{X}_{2\partial}^{(n)} = \frac{1-\theta}{h^2} \mathbf{E}, \quad \text{where } \mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}^T \in \mathbb{R}^{N \times 2}.$$

Let us apply Theorem 4. By direct calculation we get that for this discrete mesh operator the conditions in (3) are satisfied. (In the second inequality we verify the condition $\mathbf{X}_1^{(n)} \mathbf{e} \geq \mathbf{e}_0$.) Since $\mathbf{X}_{10}^{(n)}$ is an M-matrix, therefore its inverse is nonnegative. Therefore, the validity of (P1) and (P2) is straightforward. Since (P3) can be written as

$$(\mathbf{X}_{10}^{(n)})^{-1} \mathbf{X}_2^{(n)} = (\mathbf{X}_{10}^{(n)})^{-1} [\mathbf{X}_{2,0}^{(n)}, \mathbf{X}_{2\partial}^{(n)}] = (\mathbf{X}_{10}^{(n)})^{-1} \mathbf{X}_{2,0}^{(n)} + (\mathbf{X}_{10}^{(n)})^{-1} \mathbf{X}_{2\partial}^{(n)} \geq \mathbf{0},$$

due to the obvious relation $(\mathbf{X}_{10}^{(n)})^{-1} \mathbf{X}_{2\partial}^{(n)} \geq \mathbf{0}$, we get the following statement.

Theorem 5. The finite difference discrete mesh operator has all the discrete qualitative properties if the condition

$$(\mathbf{X}_{10}^{(n)})^{-1} \mathbf{X}_{2,0}^{(n)} \geq \mathbf{0} \quad (6)$$

is satisfied.

Clearly, to satisfy (6) the condition $\mathbf{X}_{2,0}^{(n)} \geq \mathbf{0}$ is sufficient. Hence, we get

Theorem 6. Under the condition $\Delta t/h^2 \leq 0.5$ the finite difference discrete mesh operator has all the discrete qualitative properties.

However, the necessity of this condition is not clear. Due to the special structure of these matrices (they are uniformly continuant, symmetrical tridiagonal matrices), they have some special qualitative properties, which will be considered in the sequel.

Hereafter we investigate the real, uniformly continuant, symmetrical tridiagonal matrices

$$\mathbf{X}_{10} = \text{tridiag}[-z, 2\tilde{w}, -z]; \quad \mathbf{X}_{20} = \text{tridiag}[s, \tilde{p}, s]. \quad (7)$$

We assume that $z > 0$ and $s > 0$. Then, we can consider the equivalent form of the matrices,

$$\mathbf{X}_{10} = z \cdot \text{tridiag}[-1, 2w, -1]; \quad \mathbf{X}_{20} = s \cdot \text{tridiag}[1, p, 1], \quad (8)$$

where $w = \tilde{w}/z$ and $p = \tilde{p}/s$. The inverse of such a matrix can be defined directly, with the aid of the one-pair matrix $\mathbf{G} = (G_{ij})$, depending on the parameter w as

$$G_{i,j} = \begin{cases} \gamma_{i,j}, & \text{if } i \leq j \\ \gamma_{j,i}, & \text{if } j \leq i \end{cases} \quad (9)$$

and for $w > 1$ we have $\gamma_{i,j} = \frac{\text{sh}(i\vartheta)\text{sh}(N+1-j)\vartheta}{\text{sh}\vartheta\text{sh}(N+1)\vartheta}$ with $\vartheta = \text{arch}(w)$. Hence we have the relation $\mathbf{X}_{10}^{-1} = (1/z)\mathbf{G}$, thus, for the matrix $\mathbf{X}_{pr} = \mathbf{X}_{10}^{-1}\mathbf{X}_{20}$ a direct computation verifies the validity of the relation

$$\mathbf{X}_{pr} = \frac{s}{z} [(2w+p)\mathbf{G} - \mathbf{I}_0], \quad (10)$$

where $\mathbf{I}_0 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ denotes the unit matrix. Using (10), we obtain the following statement.

Theorem 7. Let us suppose that $w > 1$. Then $\mathbf{X}_{pr} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ is non-negative for an arbitrary fixed N if and only if the conditions

$$2w + p > 0, \quad \gamma_{i,i} \geq \frac{1}{2w + p}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (11)$$

are fulfilled.

For the diagonal elements of the matrix \mathbf{X}_{pr} the relation

$$\min \{\gamma_{i,i}, \quad i = 1, 2, \dots, N\} = \gamma_{1,1} = \gamma_{N,N}$$

holds. Hence we get that $\mathbf{X}_{pr} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ is non-negative for an arbitrary fixed N if and only if the conditions (11) and

$$\frac{\text{sh}(N\vartheta)}{\text{sh}((N+1)\vartheta)} \geq \frac{1}{2w + p} \quad (12)$$

are satisfied. Obviously the following relations are true:

$$\sup \left\{ \frac{\text{sh}(N\vartheta)}{\text{sh}((N+1)\vartheta)}; N \in \mathbb{N} \right\} = \text{ch}(\vartheta) - \text{sh}(\vartheta) = \exp(-\vartheta),$$

$$\exp(-\vartheta) = \exp(-\text{arch}(w)) = \exp\left(\ln\left[w + \sqrt{w^2 - 1}\right]^{-1}\right) = \left[w + \sqrt{w^2 - 1}\right]^{-1}.$$

Therefore, from some sufficiently large $N_0 \in \mathbb{N}$ the relation $\mathbf{X}_{pr} \geq \mathbf{0}$ may be true only if the condition $\left[w + \sqrt{w^2 - 1}\right]^{-1} > \frac{1}{2w + p}$, i.e., the condition

$$p > -w + \sqrt{w^2 - 1} \quad (13)$$

is fulfilled. This proves the following

Theorem 8. Assume that $z > 0$, $s > 0$ and $w > 1$. If, for some number $N_0 \in \mathbb{N}$, the conditions (11) and (12) are satisfied, then all matrices $\mathbf{X}_{pr} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ with $N \geq N_0$ are non-negative. Moreover, there exists such a number N_0 if and only if the condition (11) (13) holds.

Let us analyze the conditions for different values of N_0 . When $N_0 = 1$, then due to the relation $\frac{\text{sh}\vartheta}{\text{sh}(2\vartheta)} = \frac{1}{2\text{ch}\vartheta} = \frac{1}{2w}$, (12) results in the condition

$$p \geq 0. \quad (14)$$

Since $\frac{\text{sh}(2\vartheta)}{\text{sh}(3\vartheta)} = \frac{2\text{ch}(\vartheta)}{4\text{ch}^2(\vartheta) - 1} = \frac{2w}{4w^2 - 1}$, for $N_0 = 2$ the condition (12) results in the assumption

$$p \geq -\frac{1}{2w}. \quad (15)$$

Let us apply the above results to the finite difference discrete mesh operator, by using the notation $q = \Delta t/h^2$. In case $\theta = 0$ we have $\mathbf{X}_{pr} = \text{tridiag}[q, 1 - 2q, q]$, hence the condition is $q \leq 0.5$. In case $\theta = 1$ we have $\mathbf{X}_{pr} = (\text{tridiag}[-q, 1 + 2q, -q])^{-1}$. Since $\text{tridiag}[-q, 1 + 2q, -q]$ is an M-matrix, hence for this case we do not have any condition for the choice of q . Let us assume that $\theta \in (0, 1)$.

Then we can use the form (8) with the choice

$$z = \frac{\theta q}{\Delta t}, \quad s = \frac{(1 - \theta)q}{\Delta t}, \quad w = \frac{1 + 2\theta q}{2\theta q}, \quad p = \frac{1 - 2(1 - \theta)q}{(1 - \theta)q}. \quad (16)$$

Since for the considered θ we have $z > 0$, $s >$ and $w > 1$, Theorem 7 and its consequences are applicable.

Using (14), we directly get that the condition of the non-negativity preservation for all $N = 1, 2, \dots$ is the condition

$$q \leq \frac{1}{2(1 - \theta)}. \quad (17)$$

| θ | $N = 1$ | $N = 2$ | $N = \infty$ |
|--------------------|----------|---------------|-------------------|
| 0 | 0.5 | 0.5 | 0.5 |
| $0.5 - (12q)^{-1}$ | 0.8333 | 0.9574 | 0.9661 |
| 0.5 | 1 | $2\sqrt{3}/3$ | $2(2 - \sqrt{2})$ |
| 1 | ∞ | ∞ | ∞ |

Table 1: Non-negativity providing upper bounds for q in the different finite difference mesh operators.

However, the non-negativity preservation for all $N = 2, 3, \dots$ should be guaranteed by the weaker condition (15), which, in our case, yields the upper bound

$$q \leq \frac{-1 + 2\theta + \sqrt{1 - \theta(1 - \theta)}}{3\theta(1 - \theta)}. \quad (18)$$

Our aim is to get the largest value for q under which the non-negativity preservation for sufficiently large values N still holds. The necessary condition (13) results in the bound

$$q \leq \frac{1 - \sqrt{1 - \theta}}{\theta(1 - \theta)}. \quad (19)$$

We can summarize our results as follows.

Theorem 9. The finite difference discrete mesh operator \mathcal{L} is non-negativity preserving (and hence, it has all discrete qualitative properties) for each $N \geq 1$ if and only if the condition (17) holds. It is non-negativity preserving for each $N \geq 2$ only under the condition (18). There exists a number $N_0 \in \mathbb{N}$ such that \mathcal{L} is non-negativity preserving for each $N \geq N_0$ if and only if the weaker condition (19) is satisfied.

We demonstrate our results on some special choices of θ . The results are shown in Table 1.

REFERENCES

- [1] Ladyzhenskaya, O. A., Solonnikov, V. A., Ural'tseva, N. N. Linear and quasilinear equations of parabolic type. Nauka, Moscow, 1967.
- [2] Faragó, I. Tarvainen, P. Qualitative analysis of one-step algebraic models with tridiagonal Toeplitz matrices, Period. Math. Hungar., 1997.
- [3] Faragó, I. Horváth, R. Discrete maximum principle and adequate discretizations of linear parabolic problems. SIAM Scientific Computing, 2006.
- [4] Faragó, I. Horváth, R. Continuous and discrete parabolic operators and their qualitative properties, IMA Numerical Analysis, 2008.

- [5] Faragó, I., Korotov,S., Szabó,T. Non-negativity preservation of the discrete nonstationary heat equation in 1D and 2D, *Aplimat-Journal of Applied Mathematics*, 2010.

To adequacy problem instability of steady-state plane-parallel shearing flows in ideal stratified fluid

Gavriliyeva A.¹, Gubarev Yu.²

¹*V. P. Larionov's Institute of Physico-Technical Problems of the North, Yakutsk, Russian Federation;*

gav-ann@yandex.ru

²*Lavrentyev Institute for Hydrodynamics, Novosibirsk, Russian Federation;*

Yu.G.Gubarev@mail.ru

Abstract

A problem on linear stability of stationary plane-parallel shearing flows in a continuous stratified in density inviscid incompressible fluid in a gravity field between two immovable impermeable solid parallel infinite plates is studied. With the use of the direct Lyapunov method it is proved that this flows from the theoretical consideration absolutely unstable with respect to small plane perturbations. Namely, a priori lower estimate is constructed; the estimate displays exponential in time growth of the considered perturbations. At that increment contained in it exhibitors is any positive constant. The domain of applicability of the known necessary condition of linear instability of the steady-state plane-parallel shearing flows of the ideal incompressible liquid stratified on density in the field of the gravity (the Miles theorem) is strictly described. Also with the use of the direct Lyapunov method constructive sufficient conditions of practical (on finite temporal intervals) instability if this flows with respect to small plane perturbations are found. This constructive sufficient conditions the linear instability can provide with a foundation for the creation of effective methods of managing the stationary currents in the real-time mode or various software products/numerical algorithm.

Keywords: an ideal stratified fluid, stationary plane-parallel flows, of the direct Lyapunov method, an absolutely theoretical instability, a priori lower estimate, conditions of practical instability.

Acknowledgements: ministry of education and science of the Russian federation, the agreement 14. B37. 21. 0355.

Introduction

The stability problem of steady-state plane-parallel shear flows of a continuously stratified in density inviscid incompressible fluid in the gravity field with respect to small plane perturbations is one of fundamental problems in hydrodynamics, meteorology, oceanography and other related fields of science [1], has not lost its urgency in our time too.

Basic results on stability studying of steady-state plane-parallel shear flows of a continuously stratified in density inviscid incompressible fluid in the gravity field between two immovable impermeable solid parallel planes with respect to small plane perturbations are found by spectral method with use of integral relations [2-4]. Unfortunately, these results are correct just for perturbations as normal modes [1, 4]. Moreover, the consequence of integral ratios application is that all admissible perturbations as normal modes are not really taken into account, but only those that satisfy the additional require me nt to Taylor-Goldstein differential operator [2-4].

The absolute instability of the studied steady-state plane-parallel shear flows in theoretical sense can be verified by the direct Lyapunov method [5-7] the most powerful analytical method of the mathematical theory of hydrodynamic stability.

Formulation of the problem

Unsteady-state plane flows of an ideal heterogeneous in density incompressible fluid in the gravity field between two immovable impermeable solid parallel planes are considered.

These flows are described by evolutionary solutions to the initial-boundary value problem [1, 3]

$$\rho Du = -p_x, \rho Dv = -p_y + \rho g, D\rho = 0, u_x + u_y = 0 \text{ in } \tau; \quad (1)$$

$$v = 0 \text{ on } \partial\tau; u(x, y, 0) = u_0(x, y), v(x, y, 0) = v_0(x, y),$$

where ρ is a density of fluid, $u(x, y, t)$, $v(x, y, t)$ are component of the fluid velocity field; $p(x, y, t)$ is the pressure field perturbations; the potential field of gravity $\nabla\Phi = (0, -g)$, $g \equiv \text{const}$; $D \equiv \partial/\partial t + u\partial/\partial x + v\partial/\partial y$ is a differential operator; x, y are Cartesian coordinates; $\tau \equiv \{x, y\} : -\infty < x < +\infty, 0 < y < H\}$ is the domain of fluid flow; $\partial\tau \equiv \{(x, y) : -\infty < x < +\infty, y = 0, H\}$ its boundary; u_0, v_0 are the initial components of the fluid velocity; t is the time; H - the width of the gap between the walls.

The mixed problem (1) has exact stationary solutions of the form

$$\rho = \rho_0(y), u = U(y), v = 0, p = P(y) \equiv p_0 - \int_0^y \rho_0(y_1) \frac{d\Phi}{dy_1} dy_1 \quad (2)$$

(here ρ_0, U are an arbitrary functions in independent variable, p_0 is an additive constant, is a y_1 integration variable). These solutions correspond to the steady-state plane-parallel shear flows of a continuously stratified in density inviscid incompressible fluid in the gravity field between two immovable impermeable solid parallel planes.

Further consideration is aimed to answer the question if the stationary solutions (2) can be stable ones with respect to small plane perturbations.

The Lyapunov functional

For a start the problem (1) is linearized in about an exact stationary solutions (2). Then perturbations is sought in such subclass of plane flows that its small plane perturbations are deviations of fluid particles motion paths from the corresponding stream lines of steady-state flows (2). The description for these perturbations can be obtained with the use of the Lagrangian displacements $\bar{\xi}(x, y, t) = (\xi_1, \xi_2)$:

$$\xi_{1t} = u' - U\xi_{1x} + \xi_2 dU/dy, \quad \xi_{2t} = v' - U\xi_{2x}, \quad (3)$$

where $u'(x, y, t), v'(x, y, t)$ are small plane perturbations of velocity.

In this subclass linear analogue of energy integral are represented by next form

$$E = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^H [\rho_0(\xi_{1t}^2 + \xi_{2t}^2 - U^2\xi_{1x}^2 - U^2\xi_{2x}^2) - \frac{d\rho_0}{dy}g\xi_2^2] dy dx. \quad (4)$$

The integrand expression (4) has the constant-sign property only on states of rest and only when the following condition on density distribution of considered fluid $d\rho_0/dy < 0$ is satisfied. Superimposing arbitrarily weak speed shift destabilizes rest states in the sense that the constant-sign of integrand expression (4) is broken. As a result, the stability condition for steady-state flows (2) with respect to small plane perturbations (3) doesn't exist. It is significant that local Richardson number $Ri \equiv -(g/\rho_0)(d\rho_0/dy)(dU/dy)^{-2}$ doesn't appear in coefficients of integrand expression (4). This fact maintains that local Richardson number doesn't arise as the stability condition from energetic reasoning.

To further study, it is convenient to introduce an auxiliary functional in form

$$M \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^H \rho_0(\xi_1^2 + \xi_2^2) dy dx. \quad (5)$$

Actually, if we differentiate the integral M (5) by its argument t twice along solutions of the linearized initial-boundary problem, transform the result with the use of relations, it is not hard to arrive at the so-called virial equality

$$\frac{d^2M}{dt^2} - 2\lambda \frac{dM}{dt} + 2(\lambda^2 + \alpha)M \geq 0, \quad (6)$$

where λ is an arbitrary constant value, $\alpha \equiv g \max_{0 \leq y \leq H} |\frac{1}{\rho_0} \frac{d\rho_0}{dy}| > 0$.

Now, if constant value λ is satisfied to the requirement $\lambda > 0$ and add to differential equation (6) supplemental conditions in the form

$$M(\pi n/2\sqrt{\lambda^2 + 2\alpha}) > 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\frac{dM}{dt}(\pi n/2\sqrt{\lambda^2 + 2\alpha}) \geq 2(\lambda + \alpha/\lambda)M(\pi n/2\sqrt{\lambda^2 + 2\alpha});$$

$$\begin{aligned}
 M(\pi n/2\sqrt{\lambda^2 + 2\alpha}) &\equiv M(0)\exp(\pi n\lambda/2\sqrt{\lambda^2 + 2\alpha}), & (7) \\
 \frac{dM}{dt}(\pi n/2\sqrt{\lambda^2 + 2\alpha}) &\equiv \frac{dM}{dt}(0)\exp(\pi n\lambda/2\sqrt{\lambda^2 + 2\alpha}); \\
 M(0) > 0; \frac{dM}{dt}(0) &\geq 2(\lambda + \alpha/\lambda)M(0)
 \end{aligned}$$

under these conditions, the desired a priori exponential on the time lower estimate [5]

$$M(t) \geq C \exp(\lambda t) \quad (8)$$

will arise with the need (here C is the known positive constant).

So, we proved absolute linear theoretical instability of considered currents. While for small plane perturbations (3) inequalities of relations system (7) are sufficient conditions for practical linear instability of parallel shear flows (2) of inviscid stratified fluid, but for small plane perturbations (3) in the form of normal waves - necessary and sufficient (thanks to the fact that the positive constant λ is arbitrary one as for the rest).

It is also important that these conditions for practical linear instability are characterized by constructiveness, allowing their use for the purposes of testing and control during physical experiments and numerical calculations. Indeed, let, for example, we need to develop a technological process, which is based on the use of becoming steady-state flows on finite time space $[0, T]$, so by a choice in this space of reference temporal points $t_n = \pi n/2\sqrt{\lambda^2 + 2\alpha}$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) and by detecting falsity of the inequalities from the relations system (7) it is possible to state that the numerical solution of an interesting initial and boundary problem is carried out in a steady mode: the spontaneous rise and development of the perturbations tending to unlimited (at least, exponential) to growth on time up to infinity, is excluded. If this inequalities are true, it is necessary to correct calculation procedure so that they became false. It can be similarly offered and algorithm of experimental application of sufficient conditions of practical linear instability. Therefore, there are bases to hope for mastering of conscious management of the natural phenomena, target improvement of industrial technologies, etc. [5].

Received by Lyapunov's direct method results push to the strict description of application area of a known sufficient condition of linear stability of steady-state plane-parallel shear flows of a continuously stratified in density inviscid incompressible fluid in the gravity field, which was obtained earlier by the integral relations method for the small plane perturbations in the form of normal waves - the Miles theorem [3, 4].

The Miles theorem

Evolutionary solutions of the form

$$\xi_1(x, y, t) \equiv f_1(y) \exp(ik(x - ct)), \quad \xi_2(x, y, t) \equiv f_2(y) \exp(ik(x - ct)) \quad (9)$$

$$p'(x, y, t) \equiv f_3(y) \exp(ik(x - ct))$$

(here f_1, f_2, f_3 are arbitrary functions of its argument; i is the imaginary unit; $c \equiv c_r + ic_i$ - an arbitrary complex constant, k, c_r, c_i are arbitrary real constants) are considered.

Substituting the relations (9) into the motion equations and the boundary condition, we conclude that the functions f_1, f_2, f_3 are solutions to the system of ordinary differential equations

$$\rho_0(c - U)^2 k f_1 = i f_3, \quad (10)$$

$$\rho_0(c - U)^2 k^2 f_2 = \frac{df_3}{dy} - g \frac{d\rho_0}{dy} f_2, ik f_1 + \frac{df_2}{dy} = 0$$

supplemented by boundary conditions

$$f_2 = 0 \text{ on } y = 0, H. \quad (11)$$

By excluding from system (10) functions f_1 and f_2 one defining equation for function $f(y) \equiv (c - U)f_2$ - the type equation Taylor-Goldstein [3, 4] also can be received

$$\frac{d}{dy}(\rho_0 \frac{df}{dy}) + (\frac{d}{dy}(\rho_0 \frac{dU}{dy}) \frac{1}{c - U} - \rho_0 k^2 - \frac{d\rho_0}{dy} \frac{g}{(c - U)^2}) f = 0, \quad (12)$$

$$f = 0 \text{ on } y = 0, H.$$

Following Miles, we need to make yet another substitution of the sought function $f(y) \equiv (U(y) - c)^{1/2} h(y)$, and the received after this substitution relation to multiply by the complex-conjugate function h^* and to separate its imaginary part :

$$c_i (-\rho_0 |\frac{dh}{dy}|^2 - \rho_0 k^2 |h|^2 + \frac{|h|^2}{|U - c|^2} (\frac{\rho_0}{4} (\frac{dU}{dy})^2 + g \frac{d\rho_0}{dy})) = \text{Im}[\frac{d}{dy}(\rho_0 (U - c) h^* \frac{dh}{dy})]. \quad (13)$$

The equality (13) integration over the layer cross-section between two immovable impermeable solid parallel planes with the use of boundary conditions (10) gives the relation in the form

$$c_i \int_0^H \frac{|h|^2}{|U - c|^2} (\frac{\rho_0}{4} (\frac{dU}{dy})^2 + g \frac{d\rho_0}{dy}) dy = c_i \int_0^H (\rho_0 |\frac{dh}{dy}|^2 + \rho_0 k^2 |h|^2) dy > 0. \quad (14)$$

From this relation it follows that the exponentially growing ($c_i > 0$) small plane perturbations (3) in the form of normal waves (9) are able to convert it into an identity if and only if $Ri < 1/4$ at least at one point within the domain of the fluid flow.

In the end, it is established the Miles sufficient condition [3, 4]

$$Ri \geq 1/4 \quad (15)$$

of the exact stationary solutions (2) to the mixed problem (1) with respect to small plane perturbations (3) in the form of normal waves (9).

However, as it is demonstrated below, the ratio (14) follows from equation (13) not for all functions $h, U, \rho_0 \in C^2[0, H]$.

In fact, if the integral of the right-hand part of the equality (13) is rewritten in the form

$$\int_0^H \operatorname{Im}\left(\frac{d}{dy}[\rho_0(U-c)h^* \frac{dh}{dy}]\right) dy = \operatorname{Im}\left(\int_0^H d(\rho_0(U-c)h^* \frac{dh}{dy})\right) =$$

$$\operatorname{Im}[\rho_0(H)(U(H)-c)h^*(H) \lim_{y \rightarrow H} \frac{h(y)-h(H)}{y-H} -$$

$$\rho_0(U(0)-c)h^*(0) \lim_{y \rightarrow 0} \frac{h(y)-h(0)}{y-0}] \quad (16)$$

then the latter implies that the situation is possible that

$$\operatorname{Im}[\rho_0(H)(U(H)-c)h^*(H) \lim_{y \rightarrow H} \frac{h(y)-h(H)}{y-H}] \rightarrow 0 \cdot \infty \text{ and/or} \quad (17)$$

$$\operatorname{Im}[\rho_0(U(0)-c)h^*(0) \lim_{y \rightarrow 0} \frac{h(y)-h(0)}{y-0}] \rightarrow 0 \cdot \infty$$

for the reason that the function dh/dy consists of a countable set of branches. Examples of these functions dh/dy represent logarithmic, inverse trigonometric and other functions.

Specifically, as the function df/dy is not contained in the formulation of the boundary value problem (12), then there is no way to select one or the other branch of functions dh/dy uniquely. Thus, function dh/dy can have a countable set of branches and for already found solution of a boundary problem (12). As a result, neither the relations (14) nor a Miles sufficient condition of stability (15) won't arise from the equations (13). Therefore, when function dh/dy consists of a countable set of branches, there can be exponential arising small plane perturbations (3) in the form of normal waves (9) in case Miles sufficient condition (15) of linear stability is true because these growing perturbations don't fall under its action.

As a result, the Miles theorem is right not for all functions $h(y)$ (13), but only for their subclass with derivatives dh/dy , which consist of a finite number of branches. That's what says for the fact that the condition (15) of theoretical linear stability is not only sufficient but also necessary in nature, and besides with respect to the adjective partial class of small plane perturbations (3) in the form of normal waves (3), (9), (14).

Further the example of exact stationary flows (2) and imposed on them small plane perturbations (2), (9) on which action sufficient stability conditions of Miles doesn't extend is constructed.

Example

Let's consider the ideal stratified liquid with an exponential profile of density and a linear profile of speed:

$$\rho_0 \equiv be^{-my}; U \equiv by + b_1; b, b_1 > 0.$$

Then Richardson's number becomes $Ri = mg/b^2$ and the boundary problem (12) for the equation of Taylor-Goldstein type will become:

$$f_{yy} + \left(\frac{-mb}{c + by - b_1} - (k^2 + m^2/4) + \frac{mg}{(c + by - b_1)^2} \right) f = 0; \quad (18)$$

$$f = 0 \text{ on } y = 0, H.$$

Without community restriction the equation (18) can be rewritten in form

$$(c + by - b_1)^2 f_{yy} + (-mb(c + by - b_1) - (k^2 + m^2/4)(c + by - b_1)^2 + mg) f = 0. \quad (19)$$

The general solution of the last equation looks like:

$$f(y) = C_1 M_{(-\frac{m^*}{2k}, \nu)}(-2k^*(c + by - b_1)) + C_2 W_{(-\frac{m^*}{2k}, \nu)}(-2k^*(c + by - b_1)), \quad (20)$$

where $C_{1,2}$ are constant; $\nu_{1,2} = \pm\sqrt{1/4 - Ri}$; $m^* = m/b$, $k^* = \sqrt{m^2/b^2 + 4k^2/b^2}$ and $M_{(-\frac{m^*}{2k}, \nu)}(y)$, $W_{(-\frac{m^*}{2k}, \nu)}(y)$ are Whittaker's transcendental functions [8].

In order to the found general solution of the equation (19) was also the solution of a boundary problem (18) for the equation like Taylor-Goldstein on search of eigen values and eigen functions, the performing dispersion relation is required in form

$$M_{(-\frac{m^*}{2k}, \nu)}(-2k^*(c - b_1))W_{(-\frac{m^*}{2k}, \nu)}(-2k^*(c + bH - b_1)) =$$

$$M_{(-\frac{m^*}{2k}, \nu)}(-2k^*(c + bH - b_1))W_{(-\frac{m^*}{2k}, \nu)}(-2k^*(c - b_1)). \quad (21)$$

Unfortunately, this dispersion relation is too difficult that its roots could be found in an explicit form by analytical methods. But it is necessary to notice that Whittaker's functions (20) have a countable set of branches such that there is a situation (17). Thus, perturbations (9), (18)-(21) don't fall under action of the theorem of Miles and can grow over time regardless of that, the sufficient condition of stability of Myles (15) is satisfied or isn't.

Conclusions

In this article the problem on linear stability of stationary plane-parallel shearing flows (2) in a continuously stratified in density inviscid incompressible fluid in a gravity field between two immovable impermeable solid parallel infinite plates is considered.

By the direct Lyapunov method, it is proved that this flow is absolutely unstable in the theoretical sense with respect to small plane perturbations (3). Constructive sufficient conditions (see on the inequality of the system of equations (7)) the linear instability is deduced. A priori lower estimate (8) is constructed that displays exponential in time growth of the considered small perturbations. Strictly describes the application field of the Miles theorem (15), (17) and found that, by its nature, this theorem is a sufficient and the necessary statement but for dependent special class of perturbations.

Finally, with regard to the question of how adequately whether the mathematical model (1) ideal continuously stratified fluid describes the stationary plane-parallel shear flows (2) in the gravity field, it should be said, that is not adequate, since this model does not have the theoretically stable solutions of (2), which would correspond to the established plane-parallel shear flows, although this kind of flow, and in nature are observed, and in the application are being realized. However, if the conditions failure (refer to the inequality of the system of equations (7)) the linear instability of the stationary solutions (2) mixed problem (1) will be stable with respect to small plane perturbations (3) in the form of normal waves (9) on those or any other finite time intervals.

It follows that the mathematical model (1) does not adequately characterizes the steady-state plane-parallel shear flow (2) in the theoretical sense (at the semi-infinite intervals of time), but adequately, in a practical (at the end of time).

In the end, constructive sufficient conditions (see on the inequality of the equations system (7)) the linear instability can provide with a foundation for the creation of effective methods of managing the stationary currents (2) in the real-time mode.

REFERENCES

- [1] Dikii L.A. Hydrodynamic stability and atmosphere dynamics. Leningrad. 1976.
- [2] Howard L.N. Note on a paper of John Miles// *J. Fluid Mech.*, V. 10, 4, P. 509-512, 1961.
- [3] Miles J.W. On the stability of heterogeneous shear flows // *J. Fluid Mech.*, V. 10, 4, P. 496-508, 1961.
- [4] P. Drazin. Introduction to Hydrodynamic stability. Cambridge university press, 2002.
- [5] A.A. Gavrilieva, Yu. G. Gubarev, M.P. Lebedev. Rapid Approach to Resolving the Adequacy Problem of Mathematical Modeling of Physical Phenomena by the Example of Solving One Problem of Hydrodynamic Instability // *International Journal of Theoretical and Mathematical Physics*, V. 3, 4, P. 123-129.
- [6] Gubarev Yu.G. The development of Lyapunov's direct method in the application to new types of problems of hydrodynamic stability theory // In: *Progress in nonlinear analysis research* / Ed. Erik T. Hoffmann. Chapter 7. New York: Nova science publishers, inc., - 2009. - P. 137-181. (ISBN 978-1-60456-359-7).
- [7] Lyapunov A.M. The general problem of the stability of motion. Taylor and Francis. London. 1992. P. 242.
- [8] H. Bateman, A. Erdelyi. Higher transcendental functions. V. 1. NY.ING. 1953.

Three recipes for constructing of exponentially convergent algorithms for operator equations

Ivan Gavriluk

University of Cooperative Education, Eisenach, Germany;

ipg@ba-eisenach.de

Abstract

We discuss methods to obtain exponentially convergent algorithms for functions of an operator, especially for solution operators of abstract differential equations which are the meta-models of partial differential equations

Keywords: operator equations in Banach spaces, differential equations with operator coefficients, exponentially convergent algorithms (ECA), methods of construction of ECA.

Acknowledgements: the invitation of organisers is thankfully acknowledged.

Introduction

Exponential convergence of approximations to differential equations with unbounded operator coefficients plays a crucial role to obtain algorithms of optimal or near optimal complexity [9, 14, 10, 11, 12, 16]. One can obtain such approximations by appropriate approximation of the so called solution operator S of the problem, i.e. of the operator which maps the input data into the solution of the problem. For example, in the case of the solvable operator equation

$$Au = f \tag{1}$$

with an invertible linear operator A the solution operator is $S = S(A) = A^{-1}$. In the case of the initial value problem

$$u'(t) + Au = 0, \quad u(0) = u_0 \tag{2}$$

with an operator coefficient A in a Banach space and the input data u_0 the solution operator is the operator exponential $S = S(t) = e^{-At}$. The abstract equation of the Schrödinger type

$$u'(t) = iBu(t), \quad u(0) = u_0 \tag{3}$$

plays an important role in many applications. The solution operator of this problem is the operator family (the so called Schrödinger operator exponential) $S(t) = S(t; B) = e^{iBt}$ such that the solution of the IVP is given by $u(t) = S(t)u_0$.

There are several general ideas leading to exponentially convergent approximations. In the present paper we will shortly discuss three of them: the use of the Cayley transform together with an appropriate interpolation formula, the Dunford-Cauchy representation of the solution operator together with an appropriate quadrature rule and the homotopy idea.

The Cayley transform

The Cayley transform of unbounded operators allows one to switch from the study of solution operator as a function of an unbounded operator to a function of a bounded operator and then use an appropriate approximation (e.g. an interpolation formula, a quadrature rule etc.) with the exponential accuracy. This idea can be also used to “separate the variables” and on this way to obtain algorithms of low complexity. In the case when the “spatial” operator involved is of the form $B = B_1 + B_2 + \dots + B_d$ one can separate the “spatial” operators B_1, B_2, \dots, B_d via the tensor product and so arrive at a fully separated approximation with a linear dependence on the dimension d [14, 9]. Concerning the time-dependent problems the Cayley transform allows to switch from “continuous time” to the discrete one [2] as well as to separate the time variable from the spatial ones.

In the theory of operators in Hilbert space the Cayley transform $T_{\gamma, \delta}^{\alpha, \beta} = (\alpha I + \beta A)(\gamma I - \delta A)^{-1}$, $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{C}$ is frequently used to switch from the study of closed but in general unbounded linear operator A with dense domain $D(A)$ ($\overline{D}(A) = H$) to that of the bounded operators $T_{\gamma, \delta}^{\alpha, \beta}$ (see e.g. [1] where the transform $T_\gamma = (\gamma I + A)(\gamma I - A)^{-1}$, $\gamma = -i$ converts a self adjoint (symmetric, dissipative) operator A into unitary (respectively, isometric, contractive) operator T_γ).

In [2, 3, 7, 8, 9, 15, 16, 19, 23, 14] the Cayley transform has been used to obtain explicit and constructive representations of the solutions of various evolution differential equations with operator coefficients where, in fact, the solution with continuous time parameter where represented through the ones with discrete time. In [8, 18] the Cayley transform has been used to obtain explicit representation of some important operator equations e.g. the Lyapunov equation, the equation defining fractional powers of an operator etc. A further important feature of these representation is the fact that they serve as the basis for algorithms without accuracy saturation, i.e. their accuracy increases automatically and unboundedly together with the smoothness of the input data. In the case of analytical input data the convergence rate becomes exponential.

In [9, 14] the idea was applied to the Schrödinger differential equation in abstract setting with a strongly positive “spatial” operator coefficient B in some Banach space (the spectral set of such operator coefficient lies in some angle in the right half-plane and the resolvent possesses a prescribed behavior at the infinity). On the basis of an exact representation of the solution with use of the Cayley transform, an approximation was proposed with the accuracy depending on the smoothness of this solution. It was shown that for the analytical initial vectors this approximation possesses a super exponential

convergence rate. These ideas together with special tensor-product representation were developed in [14] for multidimensional (d -dimensional) abstract differential equations in order to obtain algorithms with linear in d complexity. In the present paper we extend the results from [9, 14] to a rather general solution operators in Hilbert space.

In the case when A is a self-adjoint positive definite operator with the spectrum $\Sigma = \Sigma(A) \in [\lambda_0, \infty)$, $\lambda_0 > 0$ in a Hilbert space H the solution operator for (2) can be represented by the following Stieltjes integral

$$S(t; A) = \int_{\lambda_0}^{\infty} e^{-t\lambda} dE_{\lambda}, \quad (4)$$

where E_{λ} is the resolution of the identity for A . We say that the solution operator is generated by the function $F(t, \lambda) = e^{-t\lambda}$ and by the operator A . Analogously one can define the so called Schrödinger operator exponential $S(t) = e^{iBt}$ as the solution operator for problem (3) which can be represented by the corresponding Stieltjes integral too.

In the case when B is a self-adjoint positive definite operator with the spectrum $\Sigma = \Sigma(B) \in [\lambda_0, \infty)$, $\lambda_0 > 0$ in a Hilbert space H an arbitrary solution operator generated by B and by a function $F(t, \lambda)$ can be represented by the Stieltjes integral

$$F(t, B) = \int_{\lambda_0}^{\infty} F(t, \lambda) dE_{\lambda}, \quad (5)$$

where E_{λ} is the resolution of the identity for B .

One can separate the variable t from the operator B by the separation of the variables t and λ in the function $F(t, \lambda)$. If B is an unbounded operator then the general idea to switch to the study of bounded operators is the following. We can use some rational transform $\eta = C(w) = \frac{\lambda\alpha - \beta w}{-\lambda + w}$, $w = \lambda \frac{\alpha + \eta}{\beta + \eta} = \frac{a + b\eta}{c + d\eta}$, $a/c \neq b/d$, $\lambda = b/d$, $\alpha = a/b$, $\beta = c/d$, $\alpha \neq \beta$ where the variable w can remain in some bounded domain. The function $F(t, \eta) = F(t, C(w)) = F(t, \frac{\lambda\alpha - \beta w}{-\lambda + w})$ can be represented as a power series in w or approximated by a polynomial of w and we obtain a function of the bounded variable w .

If $F(t, z)$ is analytical with respect to z in the unit disc $|z| < 1$ then the Taylor expansion

$$F(t, z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) z^n, \quad |z| < 1 \quad (6)$$

separates the both variables. The Taylor coefficients are given by

$$c_n(t) = \frac{1}{n!} F_z^{(n)}(t, z)|_{t=0} = \frac{1}{2\pi i} \int_{|\xi|=\rho} \frac{F(t, z)}{\xi^{n+1}} d\xi. \quad (7)$$

Example 1. Let $F(t, z) = F(t, z; \alpha) = (1 - z)^{-\alpha-1} e^{\frac{tz}{z-1}}$, where for not integer parameter α we mean the principal value [28]. This is the generating function for the

Laguerre polynomials $L_n^{(\alpha)}(t)$. For each fixed t the function $F(t, z)$ is analytic in the disc $|z| < 1$. We have for it's Taylor coefficients

$$c_n(t) = c_n(t; \alpha) = \frac{1}{2\pi i} \int_{|\xi|=\rho} (1 - \xi)^{-\alpha-1} e^{\frac{t\xi}{1-\xi}} \xi^{-n-1} d\xi, \quad 0 < \rho < 1. \tag{8}$$

We change the variables by

$$u = \frac{t}{1 - \xi}, \quad \xi = 1 - \frac{t}{u}, \quad d\xi = \frac{t}{u^2} du, \tag{9}$$

where the linear-fractional mapping $u = \frac{t}{1-\xi}$ translates the circle $|\xi| = \rho < 1$ into a circle Γ which includes the point $t > 0$ but does not include the point 0. Then we get

$$\begin{aligned} c_n(t) = c_n(t; \alpha) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{u}{t} e^{t-u} \left(\frac{u-t}{u}\right)^{-n-1} \frac{t}{u^2} du \\ &= t^{-\alpha} e^t \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{u^{\alpha+n} e^{-u}}{(u-t)^{n+1}} du = t^{-\alpha} e^t \frac{1}{n!} (t^{\alpha+n} e^{-t})^{(n)}. \end{aligned} \tag{10}$$

Comparing this equality with the Rodrigue's formula for the Laguerre polynomials we see that $c_n(t) = c_n(t; \alpha) = L_n^{(\alpha)}(t)$, i.e. we have the expansion (see also [4, v.2, Ch. 10.12])

$$(1 - z)^{-\alpha-1} e^{\frac{tz}{z-1}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{(\alpha)}(t) z^n \tag{11}$$

Replacing formally $\frac{z}{z-1}$ by A we obtain the following representation for the operator exponential e^{-At} :

$$e^{-At} = (E - A)^{-\alpha-1} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{(\alpha)}(t) [A(A - E)^{-1}]^n. \tag{12}$$

Analogously after the substitution $z \rightarrow iB(iB - I)^{-1}$ we obtain formally

$$e^{iBt} = -(iB - I)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{(0)}(t) T^n, \tag{13}$$

where $T = T(B) = iB(iB - I)^{-1}$ is the Cayley transform of the operator B . It was shown in [14, 9] that truncated series with N summands converge exponentially in N and, thus, represent exponentially convergent algorithms for the corresponding problems.

An other option is to interpolate the function $\tilde{F}(t, z) = F(t, w) = F(t, \frac{a+bz}{c+dz})$ by a polynomial $\mathcal{I}_N \tilde{F}(t, z)$ on the Chebyshev, Chebyshev-Radou or Chebyshev-Gauss-Lobatto nodes (see e.g. [6]), i.e. $F(t, w) = F(t, \frac{a+bz}{c+dz}) = \mathcal{I}_N(t, z) + R_N(t, z), z \in (-1, 1)$ with the reminder $R_N(t, z)$. Then the operator $F(t, B)$ can be presented by

$$F(t, B) = \mathcal{I}_N(t, C(B)) + R_N(t, C(B)) \tag{14}$$

where $C(B) = (\lambda\alpha - \beta B)(-\lambda + B)^{-1}$ is the Cayley transform of B .

Let $\mathcal{P}_N(z)$ be the set of all polynomials of degree $\leq N$ defined on the reference interval $I = [-1, 1]$. Define by $[\mathcal{I}_N F](z) \in \mathcal{P}_N(z)$ the interpolation polynomial of F with respect to the Chebyshev-Gauss-Lobatto (CGL) nodes

$$\xi_j = \cos \frac{\pi j}{N} \in B, \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad \text{with } \xi_0 = 1, \xi_N = -1,$$

where ξ_j are zeroes of the polynomials $(1 - w^2)T'_N(z)$, $z \in I$ where $T_N(z)$ is the Chebyshev polynomial of the first kind.

Let $\mathcal{E}_\rho = \mathcal{E}_\rho(I) := \{z \in \mathbb{C} : |z - 1| + |z + 1| \leq \rho + \rho^{-1}\}$ be the Bernstein's analyticity ellipse with foci at $z = \pm 1$ and the sum of semi-axes equal to $\rho > 1$. Let the function $\tilde{F}(t, z)$ can be analytically extended from $z \in [-1, 1]$ onto \mathcal{E}_ρ for all t and be bounded by $M(t)$. The following well known Theorem (see e.g. [25]) gives the error bound for the interpolation with the Chebyshev-Gauss-Lobatto (CGL) nodes.

Theorem 1. Let $\tilde{F}(t, z)$, $z \in [-1, 1]$ has an analytic extension to \mathcal{E}_ρ bounded by $M = M(t) > 0$ in \mathcal{E}_ρ (with $\rho > 1$). Then we have

$$\|\tilde{F}(t, z) - \mathcal{I}_N(t, z)\|_{\infty, I} \leq (1 + \Lambda_N) \frac{2M}{\rho - 1} \rho^{-N}, \quad N \in \mathbb{N}_{\geq 1}, \quad (15)$$

where $\Lambda_N = \mathcal{O}(\ln N)$ is the Lebesgue constant.

The next theorem shows that the Cayley transform in combination with the Chebyshev-Gauss-Lobatto interpolation provides an approximation for a solution operator generated by a function $F(t, z)$ and by an operator B with the exponential accuracy.

Theorem 2. Under the assumptions of Theorem 1 the approximation (14) for the solution operator $F(t, B)$ generated by a function $F(t, z)$ and a self-adjoint positive definite operator B possesses the exponential accuracy with the estimate

$$\|F(t, B) - \mathcal{I}_N(t, C(B))\| \leq c(t) \log N \rho^{-N}.$$

Proof. We have

$$\begin{aligned} \|F(t, B) - \mathcal{I}_N(t, C(B))\| &= \left\| \int_{\lambda_0}^{\infty} (F(t, \lambda) - \mathcal{I}_N(t, C(\lambda))) dE_\lambda \right\| \\ &\leq \max_{\lambda \in [\lambda_0, \infty)} |F(t, \lambda) - \mathcal{I}_N(t, C(\lambda))| \\ &= \max_{z \in [-1, 1]} |\tilde{F}(t, z) - \mathcal{I}_N(t, z)| = \max_{z \in [-1, 1]} \left| F\left(t, \frac{a + bz}{c + dz}\right) - \mathcal{I}_N(t, z) \right| \leq c(t) \log N \rho^{-N}. \end{aligned}$$

Example 2. Let us consider the function $F(t, z) = e^{-tz}$ which generates the solution operator $F(t, A) = e^{-tA}$ of the heat type equation

$$u'(t) + Au = 0, \quad u(0) = u_0.$$

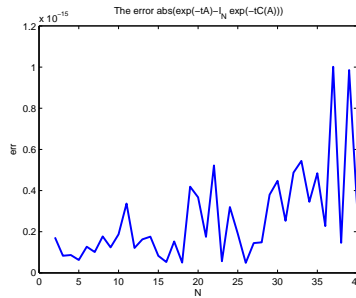


Fig. 1: Error for the exponential function for $A = 10^{18}$, $t = 10$

Fig.1 shows the behavior of the error versus number of interpolation nodes N for the Cayley transform method using the interpolation polynomial for $\exp(-t\frac{a+bx}{c+dx})$. Since the interpolation polynomial is badly conditioned, we have used the MATLAB procedures `[kip,s,mu]=polyfit(x,y,length(x)-1)` and `polyval(kip,(z-mu(1))/mu(2))` in order to compute the interpolation polynomial at z , where x contains the Chebyshev-Gauss-Lobatto interpolation nodes, y contains the values of the function $\exp(-t\frac{a+bx}{c+dx})$ with $a = 1, b = -1, c = 1, d = 1$ at the interpolation nodes.

Example 3. Let us consider the function $F(t, z) = e^{itz}$ which generates the solution operator $F(t, B) = e^{itB}$ of the Schrödinger type equation

$$u'(t) - iBu = 0, \quad u(0) = u_0.$$

It can be shown that the algorithm is stable for t small enough. In order to obtain solutions for large t the so called scaling and squaring method based on the simple relation $[e^{itB}]^2 = e^{i(2t)B}$ can be used. Starting with the approximate solution for $N = 20$ of the Schrödinger type equation with $B = 1., t = 2^{-8}$ and using the interpolation Cayley transform method in combination with the scaling and squaring method we obtain the solution at $t = 2^8$ with the absolute error $err = 1.612595883220246e - 009$.

The Dunford-Cauchy representation and Sinc-quadratures

The second idea is the representation of the exact solution or of the solution operator through an integral which is then discretized via an exponentially convergent quadrature rule, e.g. the Sinc-quadrature.

As an example let us consider the solution operator of problem (2), i.e. the operator exponential $S(t) = e^{-At}$ which can be represented by the Dunford-Cauchy integral

$$S(t) = S(t; A) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{-zt} (zI - A)^{-1} dz, \quad (16)$$

provided that the path Γ envelopes the spectrum of A and the improper integral converges. By an appropriate parametrization $z = z_x(\eta) + iz_y(\eta) : \eta \in (-\infty, \infty)$ this

integral can be reduced to an improper integral

$$S(t) = S(t; A) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(t, \eta) d\eta, \quad (17)$$

with an integrand which can be analytically (in η) extended into a strip of width $d > 0$ and decays exponentially at infinity. The Sinc-quadrature for such integrands provides an exponential accuracy [23, 17, 19, 10, 11, 12, 20] where the choice of the integration path Γ plays the crucial role.

As an other example we would like to mention the exponentially convergent approximations with linear in d complexity for the solution operator $S = S(A) = A^{-\sigma-1}$, $\sigma > -1$ with a linear operator $A = A_1 + \dots + A_d$ from [11].

The homotopy method

The next rather general method to construct exponentially accurate algorithms is the so called FD-method [26, 27] which is closely related to the homotopy idea.

Let us consider the operator equation

$$(A + B)u = f, \quad (18)$$

where f is a given and u an unknown elements of a Banach space X , A, B - given operators in X . We introduce the operator-valued function $W(t) = \bar{B} + t(B - \bar{B})$, $t \in [0, 1]$ with an operator $\bar{B} : X \rightarrow X$ which approximates B in some sense and consider the equation

$$(A + W(t))u(t) = f \quad (19)$$

We have obviously $u = u(1)$ for the solutions of (refs31), (refs33). We look for the vector-valued function $u(t)$ in the form of the power series

$$u(t) = \sum_{j=0}^{\infty} t^j u^{(j)}. \quad (20)$$

Substituting (20) into (19) and comparing the coefficients in the front of the powers of t we obtain

$$\begin{aligned} (A + \bar{B})u^{(j+1)} &= -(B - \bar{B})u^{(j)}, j = 0, 1, \dots, \\ (A + \bar{B})u^{(0)} &= f. \end{aligned} \quad (21)$$

The operator \bar{B} has to satisfy the following conditions: 1) the operator equations (21) are “easier” to solve as (18), 2) \bar{B} should approximate B good enough in order to arrive at a rapid convergence.

Supposing that the series (20) converges for $t = 1$ and setting $t = 1$ we obtain the following exact representation of the solution to (18):

$$u = u(1) = \sum_{j=0}^{\infty} u^{(j)}. \quad (22)$$

The truncated series with m summands represents an algorithm to obtain the approximation $\overset{m}{u}$ to the exact solution.

The next statement shows that we can control the convergence by the value $q = \|B - \overline{B}\|$ provided that $B - \overline{B}$ is bounded and gives a convergence estimate which turns to be exponential.

Theorem. Let B, \overline{B} be bounded operators, A be a closed operator with a domain $D(A), \overline{D(A)} = X$ and there exists $(A + \overline{B})^{-1}$. If

$$q = \|(A + \overline{B})^{-1}(B - \overline{B})\| < 1 \quad (23)$$

then the truncated series with m summands converges as a geometrical progression with the denominator q and the following error estimate holds true

$$\|u - \overset{m}{u}\| \leq \frac{q^{m+1}}{1 - q} \|u^{(0)}\|. \quad (24)$$

The same idea can be used for eigenvalue problems (see e.g. [13] and other publications of these authors).

REFERENCES

- [1] Akhieser N.I. and Glazman I.M.: Theory of Linear Operators in Hilbert Space, Pitman Advanced Publishing Program, London, 1980
- [2] Arov D.Z., Gavrilyuk I.P.: A method for solving initial value problems for linear differential equations in Hilbert space based on the Cayley transform, Numer. Funct. Anal. Optimization 14, No.5-6, 456-473 (1993).
- [3] Arov, D.Z.; Gavrilyuk, I.P.; Makarov, V.L.: Representation and approximation of solution of initial value problems for differential equations in Hilbert space based on the Cayley transform. In: Bandle, C. (ed.) et al., Elliptic and parabolic problems. Proceedings of the 2nd European conference, Pont-a-Mousson, June 1994. Harlow: Longman Scientific & Technical, (ISBN 0-582-23961-3/pbk). Pitman Res. Notes Math. Ser. 325, 40-50 (1995).
- [4] Bateman, H., Erdélyi, A.: Higher Transcendental Functions, Vol. 2, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, Toronto, London, 1953.

- [5] Bohonova T. Yu. , Gavrilyuk I. P. , Makarov V. L., and Vasylyk V.: Exponentially Convergent Duhamel- Like Algorithms for Differential Equations with an Operator Coefficient Possessing a Variable Domain in a Banach Space, SINUM, Volume 46 (2008), Issue 1, 365-396.
- [6] Canuto C.G., Hussaini M.Y., Quarteroni A., Zang T.A.: Spectral Methods in Fluid Dynamics, 1993.
- [7] Gavrilyuk, I.P.: Strongly P-positive operators and explicit representations of the solutions of initial value problems for second order differential equations in Banach space. Journal of Math. Anal. and Appl. 236, 327-349 (1999)
- [8] Gavrilyuk, I.P.: An algorithmic representation of fractional powers of positive operators. Numerical Funct. Anal. Optimization 17, No.3-4 , 293-305 (1996).
- [9] Gavrilyuk I.P.: Super exponentially convergent approximation to the solution of the Schrödinger equation in abstract setting , CMAM, Vol.10, No.4 (2010): 345 - 358.
- [10] Gavrilyuk I.P., Hackbusch, W. and Khoromskij, B.N.: H-matrix approximation for the operator exponential with applications, Num. Math.,(2002) 92:83-111.
- [11] Gavrilyuk,I.P., Hackbusch W., Khoromskij B.N.: Tensor-Product Approximation to Elliptic and Parabolic Solution Operators in Higher Dimensions, Computing 74, 131-157 (2005).
- [12] Gavrilyuk I.P., Hackbusch W. and Khoromskij B.N.: Data-sparse approximation of a class of operator-valued functions, Math. Comp. 74 (2005), 681-708.
- [13] Gavrilyuk I.P., Klimenko A.V., Makarov V.L., Rossokhata N.O.: Exponentially convergent parallel algorithm for nonlinear eigenvalue problems, IMA J. Numer. Anal. 2007 27: 818-838.
- [14] Gavrilyuk I.P., Khoromskij B.N.: Quantized-TT-Cayley Transform for Computing the Dynamics and the Spectrum of High-Dimensional Hamiltonians, CMAM, vol. 11. No. 3 , 2011, pp. 273-290.
- [15] Gavrilyuk, I.P.; Makarov, V.L.: The Cayley transform and the solution of an initial value problem for a first order differential equation with an unbounded operator coefficient in Hilbert space. Numer. Funct. Anal. Optimization 15 No.5-6, 583-598 (1994).
- [16] Gavrilyuk I.P., Makarov V.L.: The Cayley transform and the solution of an initial value problem for a first order differential equation with an unbounded operator coefficient in Hilbert space, Numer. Funct. Anal. Optimization 15 No.5-6, 583-598 (1994).

- [17] Gavriilyuk I.P., Makarov V.L.: Representation and approximation of the solution of an initial value problem for a first order differential equation in Banach space. *Z. Anal. Anwend.* 15, No.2, 495-527 (1996).
- [18] Gavriilyuk I.P., Makarov V.L.: Exact and approximate solutions of some operator equations based on the Cayley transform. *Linear Algebra and its Applications*, 282(1998), 97-121.
- [19] Gavriilyuk I.P., Makarov V.L.: Exponentially convergent parallel discretization methods for the first order evolution equation, *Computational Methods in Applied Mathematics*, Vol. 1, No. 4, 2001, pp. 333- 355.
- [20] Gavriilyuk I.P. and Makarov V.L.: Exponentially convergent algorithms for the operator exponential with applications to inhomogeneous problems in Banach spaces, *SIAM Journal on Num. Anal.*, Vol. 43, No. 5 (2005), pp. 2144-2171.
- [21] Gavriilyuk I.P., Makarov V.L.: Algorithms without accuracy saturation for evolution equations in Hilbert and Banach spaces, *Math. Comp.* 74 (2005), 555-583.
- [22] Gavriilyuk I.P., Makarov V.L.: An Exponential Convergent Algorithm For Nonlinear Differential Equations in Banach Spaces, *Math. Comp.* 76 (2007), 1895-1923.
- [23] Gavriilyuk I.P., Makarov, V.L.: Strongly positive operators and numerical algorithms without accuracy saturation. (in Russian), Kiev, Publishing House of the Institute of Mathematics of the Academie of Sciences of Ukraine, 2004, 499 pp.
- [24] Gavriilyuk I.P., Makarov V.L., Vasylyk V.: *Exponentially Convergent Algorithms for Abstract Differential Equations*, Springer Basel AG 2011
- [25] Khoromskij B.N.: An Introduction to Structured Tensor-Product Representation of Discrete Nonlocal Operators Part I: Approximation Tools, University of Leipzig/MPI MIS, summer 2005, <http://personal-homepages.mis.mpg.de/bokh>, <http://www.mis.mpg.de/scicomp/Fulltext/Khoromskij>
- [26] Makarov V.L.: About functional-discrete method of arbitrary accuracy order for solving Sturm-Liouville problem with piecewise smooth coefficients, *DAN SSSR*, vol. 320, no. 1, 1991, 34-39.
- [27] Makarov V.L.: FD-method: the exponential rate of convergence ", *J. Math. Sci.*, vol. 104, no. 6, 1997, 1648-1653.
- [28] Suetin P.K.: *Classical Orthogonal Polynomials*, Nauka, Moscow, 1979 (in Russian).

Study of supercomputer's architecture, application and its future use

Gonsai Atul¹, Goswami Bhargavi², Kar NarayanUdit¹

¹*Saurashtra University, India;*

atul.gosai@gmail.com

uditnarayankar@gmail.com

²*NIMS University, India;*

bhargavigoswami@gmail.com

Abstract

Generally there is only one mother super computer in each country and there are many sub super computers attached to the mother super computer. It helps in increasing the speed of calculation and can quickly perform the complex tasks as given by users because of its high processing speed and the parallel computing skills. The super computers are very useful in terms of scientific research and industrial field. It also takes the level of national scientific development to a certain extent of highness. In this paper the architecture and application of the super computer has been discussed and future development of the super computer has been proposed.

Keywords: supercomputer, parallel computing, massively parallel, Param Yuva II, Cray-1, CDC 6600.

Introduction

As the name suggests supercomputer is a computer with high performance as compared to personal computers. That means, it has something superior than normal computer. A supercomputer is a system which has largest capability and capacity with highest performance [1]. Because of this it can be used for scientific research such as NASA and industrial fields such as in IBM. A supercomputer provides high speed calculation for large amount of data. It becomes a strategy point for military in the developed countries to secure their country from unexpected attack.

Supercomputers were developed in the 1960s at Control Data Corporation (CDC) by Seymour Cray and later on known as Cray Research. At the beginning level supercomputers used only few processors but at the end of the 20th century it started using thousands of processors along with parallel supercomputers [2].

Each country contributes in supercomputing in different ways for its various application. In Japan it concentrates on both development and application. The government of Japan develops supercomputers and commercial companies develop its application [1].

Figure 1 shows the Blue Gene/P supercomputer that runs over 250000 processors using normal data centre air-conditioning. It grouped in 72 racks that are connection through high-speed network.

History of supercomputers

Seymour Cray founded a new company, Control Data Corporation (CDC). He decided to develop a supercomputer using circuits and transistors [11]. The first supercomputer was CDC 6600 which was developed in 1964 [3], [7] by CDC [11]. Cray founded his own company in 1970s and started developing supercomputer with new approach. In the beginning of 1980s, use of processor in super computer was not much, but in 1990s it becomes thousands of processors were used in supercomputer that appeared in Japan and United State [4].



Fig. 1: CDC 6600

The supercomputer started using thousands of processors similar to personal computer by the end of the 20th century. It progressed in first decade of 21st century by using 60,000 [4] processors in supercomputer that reached to petaflop performance levels.

The evolution of supercomputers includes 4 stages those are Budded stage (1960-1975), Vector stage (1976-1989), MPP stage (1990-2000), Massive Parallel Processor (MPP) and Cluster stage (2000-2010) [1]. Each stage has different performances that are Mflop/s (106), Gflop/s (109), Tflop/s (1012), and Pflop/s (1015) respectively, where flop/s means Floating Point Operations / Second.

In India, PARAM 8000 was the first supercomputer developed by “Centre for Development of Advanced Computing” (C-DAC) at Pune at 1990s and installed in 1991 [9]. After that the improved PARAM series was developed one by one which are listed below.

- PARAM 8600
- PARAM 9900/SS
- PARAM 10000

- PARAM Padma
- PARAM Yuva
- PARAM Yuva II

PARAM YUVA II

PARAM Yuva II is the latest addition of PARAM series. It was developed in C-DAC in a period of 3 months at a cost of 16 Crore. It was unveiled on 8th February 2013. The PARAM Yuva II released with 524 Tflop/s [22] which is 10 times faster than the PARAM Yuva. It uses 35 percent energy less than the PARAM Yuva [22]. It ranked at 33rd in the November 2012 list of Top Green 500 Supercomputers of the world in terms of energy efficiency. [20]

PARAM Yuva II will be used for research in space, bioinformatics, weather forecasting, seismic data analysis, aeronautical engineering, scientific data processing and pharmaceutical development [21]. It will also be used in scientific community to gain the crunch data in a faster way. [22]

This computer is a stepping stone towards building the future Pflop/s. C-DAC said that currently meteorologist are able to access data within 6 kilometres. With the up gradation of performance the meteorologists can access data within 10 kilometres [22].

The working of PARAM Yuva II is based on hybrid computer technology which uses hardware coprocessors and accelerators. It uses InfiniBand network which provides efficiency in data transfer. The storage capacity of this system is 200 tera bytes. It also provides a tool for complex programs that can be very easily managed by it. The PARAM Yuva II stands on 62nd position in world's Top 500 supercomputers [22].

Requirement of supercomputer

According to users' point of view, supercomputer requires solving high level of complex problems and without that problem there is no need of supercomputers [2]. As well as an organization also needs that problem gets solved very fast. So, in this way user define supercomputer.

Supercomputers are used in various fields like weather forecasting for global climate changes, quantum mechanics to study physical systems at atomic level. The other uses are in military, chemical composition and polymer research [5]. Currently it is also used in aerospace and cosmology, energy security, healthcare and medicine, manufacturing, environment protection, etc. [1].

The supercomputers are used to predict and analyse global weather patterns by the national weather service and also have been used to determine the impact they would have in particular region by simulation nuclear bomb detonation. [7]

Configuration of Cray supercomputer

The basic configurations of Cray-1 supercomputer consist of CPU, one or more minicomputer console, power and cooling equipments and mass storage disk subsystem. The CPU holds the I/O section, computation and memory of the computer. A minicomputer uses for either as a job entry station or maintenance control unit [16].

When the supercomputer was introduced in 1960s, it used parallel computing to achieve superior computational peak load [8]. Later on based on increasing demand it started using massively parallel system. In parallel supercomputing the process is divided into similar part and then solved in parallel. While the massively parallel system uses multiple processor or computers to perform a single task. Grid system is an example of massively parallel system.

The Cray-1 supercomputer was developed in year 1976. It was first general purpose supercomputer which used Vector Processor machines from Cray Research Inc [10]. Later on the addition of Cray-1 was developed that are Cray-XMP and Cray-2. They were used to solve large scale problems in science and engineering. The Fig. 2 shows the hardware design of Cray-1 supercomputer.

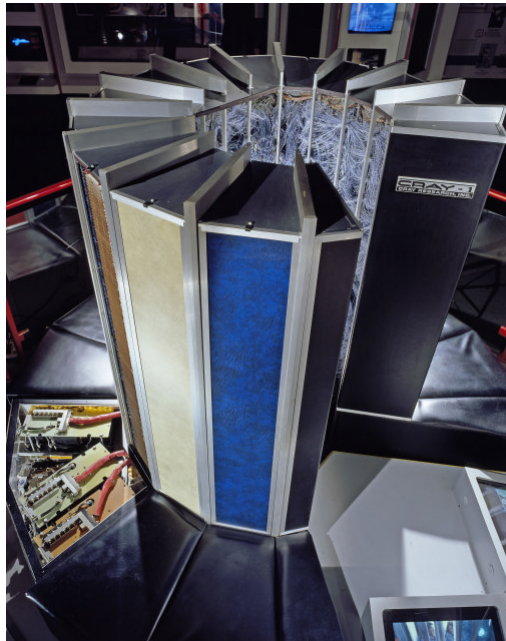


Fig. 2: CRAY-I

At that time, Cray-1 was the fastest supercomputer whose computational rate was 138 million floating-point operations per second [12].

Architecture

Cray-1 supercomputer uses register oriented vector processor which provides a great performance in science and engineering for certain types of calculation. The data transmission in it is done from memory to ALU through vector registers. So, we can say that vector registers are used as data cache between memory and functional unit (ALU). Vector registers are prepared to hold up to 64 bit vector elements [13]. The performance depends on how fast the data transfer occurs through registers.

- **Module:** The Cray-1 uses modules that were laid horizontally and stacked in tower formation. This is shown in the fig. 2. Each module has a 5 layered circuit board [12]. These 5 layers are divided into two parts, first part has 2 outer layers and second part has 3 inner layers.

The cray-1 module used up to 288 IC's. Because, the module consists number of IC's; it generated enormous heat [12]. There was a problem of signal transmission with cray-1. Cray-1 passes the standing waves and that's why, it could not reach up to the top of the level and thus reflected with weak signals.

- **Cooling:** Because, the module generated more amount of heat, the new cooling technology was developed which used available metal conductor. The vertical aluminium/stainless steel bars lined each column wall in each chassis. This technology was Freon based technology and it had 40 tone cooling capacity. It is flowing from top to bottom in each of the tower and therefore taking the heat away.



Fig. 3

- **Maintenance:** Initially, the cray-1 supercomputer Mean Time between Failure (MTBF) was order of 50 hours. It requires 2 hour maintenance daily and the additional time was devoted in the weekend. With such extensive maintenance it also gives more results than other computers running full time.

Input/Output

Cray-1 supercomputer has 24 channels for input and output. From that 12 are used for input and 12 for output. At the time of input/output, any channel can be kept active. For 16-bit channel, data transfer rates of 160 million bits per second can be achieved, and the higher rates are dependent on peripheral devices. I/O and CPU share a memory using single port [16].

Computation Section

- **Functional Unit:** The Cray-1 supercomputer used 12 functional units (CPU) at a time which allowed parallel processing. It means that the CPU fetches the next data as well as run the current task.

Because of CPU allowed parallel processing, it increased process speed and CPU dead time was minimized [12]. These 12 functional units were divided into 4 groups those are Address unit, Scalar Unit, Vector Unit and Floating-point Unit [16]. The first three groups are used to conjunct with one of the primary register type to support modes of processing of address, scalar and vector unit. The fourth group is used to support either scalar or vector operation and it will accept the operand from it then deliver it to scalar or vector accordingly. Following is the list of functional unit with its usage. All functional units execute its algorithm in fix time. Once the operands have been delivered, delays are not possible. After the completion of operand execution it sends back to the functional unit which is known as “functional unit time” and measured in 12.5 nano seconds [16].

- **Data structure:** The Cray-1 use ASCII character representation with 64-bit word means 8 characters at a time. The numeric representation is either in 64-bit floating-point form using sign bit and biased exponent or in 2’s complements form (24-bit or 64-bit).

Memory

The Cray-1 memory was organized in 16 banks; each bank had 72 modules [12]. Up to 5, 24,288 words can be arranged in 8 banks and a word consists of 64 data bits and check bits [16]. The bank cycle time is 50 nano second. It is the time required to remove or insert an element of data in memory. A single-error-correction double error detection (SECDED) feature used to make sure that the data written into memory can be return to the computation section with consistent precision. There are 8 check bit per word [16].

Operating Register

The Cray-1 has 5 registers. From that 3 are primary registers and 2 are intermediate registers. Primary registers are used by functional unit. Intermediate registers are not

accessible by functional unit but are used as buffer in between functional unit and memory. In addition, there are supporting register available in CPU. For example, channel address register and channel limit register for each I/O Channel [16].

Hardware Design

It was hand-wired and its circuits were arranged in a three-quarters circle (see Fig. 2). As a result, it helped to increase the speed at which signals travel from one part to another part of the computer. Hefty power supplies are located below each of the circuit bays and padding them suggested a piece of lounge furniture.

Application of supercomputer

The supercomputers are widely used in following areas: Scientific computing, coexistences of scientific computing and network centric. Currently supercomputer applications are being developed in two directions: Capability Computing and Capacity Computing [1].

Capability computing target is to focus on the critical scientific challenges to reduce cost and time for execution [1].

Capacity computing focuses on communication intensive applications, which means that finishing as many tasks as possible in the specified time domain [1].

The ANSYS application is an example of supercomputer application which uses Cray cX1 supercomputer. Cray cX1 system is mainly a cluster having 8 blades and that is in dedicated networks. Each blade has two Intel processors. That configured with either Windows HPC Server 2008 or Linux Operating System. One blade is designed as a "head node" or "login node" which has different properties then remaining blades and that remaining blades are called as "compute nodes" [17].

1. Good

- 8 compute blades have two 2.4 GHz Intel X5640 processors
- 8 core per blade(64 cores total),
- 12 GB RAM per blade
- InfiniBand Network 1

2. Better

- 8 compute blades have two 2.66 GHz Intel X5650 processors
- 12 core per blade(96 cores total),
- 24 GB RAM per blade
- InfiniBand Network 1

3. Best

- 8 compute blades have two 2.93 GHz Intel X5670 processors
- 12 core per blade(96 cores total),
- 48 GB RAM per blade
- InfiniBand Network 1

Future of supercomputer

As per the supercomputer community, an exascale (10¹⁸ FLOPs) supercomputer will be available in 2018. Currently the research on exascale supercomputer is being carried out across the world. The Japanese HPC community has identified the following 6 issues in its technical roadmap to overcome the difficulties toward exascale supercomputing [18].

- Improving Energy-efficiency
- Using memory hierarchy to reduce the traffic of off-chip memory
- Exploiting parallelism of millions of processing cores
- Heterogeneous computing for accelerating the performance
- Dependability of the millions of processor cores and their interconnections
- Productivity for the complicated system

The general purpose supercomputing has to face key challenges that are given as follows [19].

1. Maintaining good vector/scalar performance balance: This balance depends on high performance of a wide variety of applications, algorithm and programming styles.
2. Supporting scalability:It is evident that future supercomputers will require increasing number of processors. So, it must be scalable in future.
3. Increasing Memory capacity and performance:It is related to scalability challenge. It must be done while maintaining programmability and usability.
4. Providing high performance I/O and networking: Data transfer is always the most difficult task for the effective use of supercomputers. So, in future it must be measured by how fast the data can be transferred within the system and across the network.

But the technical report concludes that the energy-efficiency is the most difficult challenge for future supercomputing, because the future technology will use 10 times more power than current system. It is enough to supply power to 5000 homes. The future supercomputer must consume less amount of energy, as well as generate less amount of heat.

Conclusion

As per the above discussion we can say that there is only one mother supercomputer and under that there are numbers of sub supercomputer. You can also make your normal system into supercomputer by changing its configuration. The supercomputers use massively parallel computation which makes its task execution faster than normal computers. Its hardware parts are also big in size so, it requires large accommodation area. Supercomputers use huge number of ICs so it generates more heat and it has to be maintained by using some cooling system. Supercomputers require daily maintenance. There are number of challenges for future supercomputers which will overcome by supercomputer community one after the other.

REFERENCES

- [1] Xianghui XIE, Xing FANG and Sutai HU, Dong WU, "Evolution of supercomputers," *Frontiers of Computer Science in China*, vol. 4, no. 4, pp. 428-436, Dec. 2010.
- [2] Gaston D, Hansen G, Kadioglu S, et al. Parallel multiphysics algorithms and software for computational nuclear engineering. In: *Proceedings of SciDAC Workshop 2009*, June, San Diego, USA, 2009.
- [3] Bechtolsheim A. The road from peta to exaflop. In: *Proceeding of 2009 International Supercomputing Conference*, June, 2009
- [4] John A. N. Lee, John Impagliazzo, "History of computing in education" *IFIP International Federation for Information Processing*, vol. 145, pp.1-16, 2004
- [5] Hoffman, Allan R, "Supercomputers: direction in technology and applications," *Book, National Academics*, pp. 102, Dec 1989.
- [6] Bechtolsheim A. The road from peta to exaflop. In: *Proceeding of International Supercomputing Conference*, June, 2009
- [7] Amarasinghe S, Campbell D, Carlson W, et al. ExaScale software study: software challenges in extreme scale systems. *DARPA IPTO*, September, 2009

- [8] Kogge P, Bergman K, Borkar S, et al. ExaScale computing study: technology challenges in achieving exascale Systems. DARPA IPTO, September, 2008

Interaction of stabilizing and destabilizing factors and bifurcations of a phase interface in a geothermal systems

Il'ichev Andrej¹, Tsyarkin George²

¹*Steklov Mathematical Institute, Russian Ac. Sci., Moscow, Russia;*

ilichev@mi.ras.ru

²*Institute for Problems in Mechanics, Russian Ac. Sci., Moscow, Russia;*

tsyarkin@ipmnet.ru

Abstract

We study competition of the Rayleigh-Taylor instability and stabilization due to a vertical flow through the water-vapor phase transition front in a geothermal system in dependence on the width of a low-permeability layer and permeability. This competition is indicated by appearance of the non-uniqueness of localization of the stationary phase transition fronts, one of them is necessarily unstable. The multiple fronts arise as a result of a bifurcation from the stable fronts. In a neighborhood of the bifurcation point nonlinear dynamics of a narrow band of weakly unstable modes is described by the diffusion Kolmogorov- Petrovsky-Piscounov (KPP) equation.

Keywords: geothermal systems, phase transitions, stability.

Acknowledgements: the work is supported by Russian Foundation for Basic Research, projects No 11-01-00335 and 13-01-12047.

Introduction

In a number of geothermal systems (for example, such that Lardarello in Italy, Geisers In California, Matsukava in Japan) the water layer overlies the vapor one [1]. This means that the domain occupied by the water may stably exist over that one occupied by the vapor. The system, therefore, is destabilized by location of the heavier fluid over the lighter one [2], which in the case of non-mixed fluids causes the Rayleigh-Taylor instability for all perturbations even in a porous media. Nevertheless, the phase transition front, separating the water and the vapor, in the case in question is not a classical interface between two fluids: it, first of all, permits the movement of both fluids across itself and also the stabilizing thermodynamic effects take place on it (see, for example, [3]).

For the first time, the possibility of the stable water-vapor configuration was theoretically shown in [3]. At that, the motion of phases in the base vertical flow subjected to the stability investigation was absent due to the choice of the boundary conditions. In [4] the motion of phases through the phase transition front in the base flow was allowed. Such a flow arises when the water and vapor can move through the upper and lower boundaries of geothermal reservoir.

In [5] the authors considered the flows in the geothermal reservoir for absence of gravity and constancy of the phase transition temperature for various boundary conditions on the upper boundary of the geothermal layer. The Rayleigh-Taylor instability in this case doesn't take place and the location of the phase transition interface is unique for fixed physical parameters.

In [6, 7] it is shown that for the varying physical parameters bifurcation of the phase transition front can occur of the turning point type, when the appearance or disappearance of the pair of fronts takes place. One of these fronts is necessarily subjected for long-wave instability through destabilization of perturbations with the zero wave number. In this case evolution of the narrow band of weakly nonlinear waves near the threshold of instability is described by the KPP diffusion equation with the non-generate quadratic nonlinearity [8].

In this paper we investigate interaction of the destabilizing and stabilizing effects in the geothermal system with a fixed vertical drop of pressure in dependence on the width of the low-permeability layer and its permeability. For the sake of simplicity we assume that the advective heat transfer is small in comparison with the conductive one. Interaction of the instability caused by the location of the heavier fluid over the lighter one (hydrostatic instability) from one side and stabilization by the flow through the phase transition front from the other is analyzed. In particular, the rise of the non-uniqueness of the phase transition front is connected with development of hydrostatic instability. The paper organized as follows. In sec. 2 formulation of the problem is given, in 3 we give the solutions corresponding to the basic vertical flow. Sec. 4 is devoted to the method of hydrodynamic instability we used. Sec. 4 is devoted to the stability analysis of the phase transition front with the use of the bifurcation diagrams front location-width of the low permeability layer/permeability. In the discussion we analyze interaction of hydrostatic instability and the flow of fluid through the front.

Formulation of the problem

We consider flows which are realized in the high-temperature geothermal reservoirs. Let reservoir consist of two high-permeability geothermal layers separated by the layer of a low-permeability rock. The layer of the low-permeability rock represents the horizontal strip of infinite extension: $-\infty < x < \infty$, $0 < z < L$, with the z -axis directed downstairs. The upper and lower high-permeability layers are occupied by the water and vapor, correspondingly. The phase transition front is located inside the layer of the low-permeability rock. It separates domains occupied by the water and vapor (Fig. 1).

The processes of heat and mass transfer in geothermal systems are described in the framework of the equilibrium thermodynamics and obey the conservation laws of mass and energy, Darcy's law for the water and vapor and the state equation. It is assumed that the water and vapor are incompressible. The system of base equations in two domains of

the low-permeability rock separated by the phase transition front has the form

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{v}_j &= 0, \quad \mathbf{v}_j = -\frac{k}{\mu_j} (\operatorname{grad} P - \rho_j g \mathbf{e}_z), \\ (\rho C)_{2,1} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_j C_j \mathbf{v}_j \cdot \operatorname{grad} T &= \operatorname{div} (\lambda_j \operatorname{grad} T); \\ \lambda_{1,2} &= m \lambda_j + (1 - m) \lambda_s, \quad (\rho C)_{2,1} = m \rho_j C_j + (1 - m) \rho_s C_s, \quad j = v, w. \end{aligned} \tag{1}$$

Here \mathbf{v} is a vector of filtration velocity, m is a porosity, k is a permeability, μ is a viscosity, P is a pressure, g is gravity, ρ is a density, C is a specific heat, T is a temperature, λ is a thermal conductivity, \mathbf{e}_z is the basis vector of the z -axis. Subscripts w, v, s denote water, vapor and skeleton of a porous media, correspondingly, and 1 is the water domain, 2 is the vapor domain.

The conditions at the interface between the water and vapor domains are formulated as the conditions at the front of the equilibrium phase transition $z = h + \eta$ ($\eta = \eta(t, x)$ is a deviation of the front of phase transition) and have the form (see [4]; \mathbf{V} is a velocity of the phase transition front)

$$\begin{aligned} m \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_w}\right) \mathbf{V}_n &= \frac{k}{\mu_v} \frac{\rho_v}{\rho_w} (\operatorname{grad} P)_{n+} - \frac{k}{\mu_w} (\operatorname{grad} P)_{n-} + \\ &\quad + \frac{k}{\mu_w} \rho_w g \left(1 - \frac{\mu_w}{\mu_v} \frac{\rho_v^2}{\rho_w^2}\right) (\mathbf{e}_z)_n \\ m q \rho_w \mathbf{V}_n &= \lambda_- (\operatorname{grad} T)_{n-} - \lambda_+ (\operatorname{grad} T)_{n+} - \frac{k q \rho_w}{\mu_w} ((\operatorname{grad} P)_{n-} - \rho_w g (\mathbf{e}_z)_n) \\ T_+ &= T_-, \quad P_+ = P_-, \quad \ln \frac{P_-}{P_a} = A + \frac{B}{T_-}; \quad A = 12.512, \quad B = -4611.73 \text{ K} \end{aligned} \tag{2}$$

Here the subscript n denotes the normal component, “+” and “-” refer to the vapor and water domains, correspondingly, P_a is the atmospheric pressure.

The boundary conditions between the high-permeability and low-permeability layers have the form

$$z = 0 : P = P_0, \quad T = T_0; \quad z = L : P = P^0, \quad T = T^0. \tag{3}$$

For sufficiently small values of the permeability we can neglect the advective transfer of heat term in comparison with the convective one in the heat equation [4]. The equations (1) can be rewritten now as

$$\begin{aligned} \Delta P &= 0, \quad \frac{\partial T}{\partial t} = a_{1,2} \Delta T, \quad 0 < z < h \cup h < z < L, \\ a_{1,2} &= \frac{\lambda_{1,2}}{(\rho C)_{1,2}}, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \end{aligned} \tag{4}$$

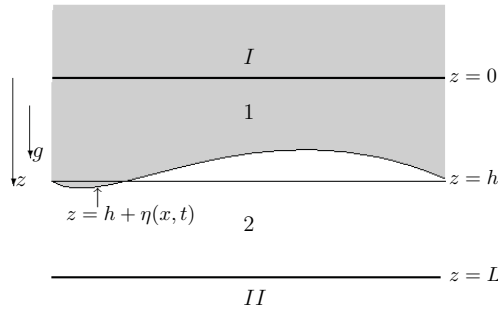


Fig. 1: Geometry of the problem; I is the high-permeability domain $\{z < 0, -\infty < x < \infty\}$, 1 is the low permeability domain $\{0 < z < h + \eta, -\infty < x < \infty\}$ occupied by the water, 2 is the low-permeability domain $\{h + \eta < z < L, -\infty < x < \infty\}$ occupied by the vapor, II is the high-permeability domain $\{z > L, -\infty < x < \infty\}$

We assume further that the effective specific heat and thermal conductivity are determined only by the corresponding parameters of the rock, i. e. $\lambda_{1,2} = \lambda$, $a_{1,2} = a$.

Vertical flow

It follows from (2)-(4), that the pressure and temperature distributions in the vertical flow have the form [4]

$$\begin{aligned} P_-^s &= P_0 + \frac{P_* - P_0}{h} z, & T_-^s &= T_0 + \frac{T_* - T_0}{h} z \\ P_+^s &= \frac{P^0 - P_*}{L - h} z + \frac{LP_* - hP^0}{L - h}, & T_+^s &= \frac{T^0 - T_*}{L - h} z + \frac{LT_* - hT^0}{L - h}, \end{aligned} \quad (5)$$

where the subscript “*” denotes the values at the front. Substituting (5) in (2) we get the equations with the unknowns P_* , T_* , and the front location h

$$\begin{aligned} \frac{\mu_w \rho_v}{\mu_v \rho_w} \frac{P^0 - P_*}{L - h} - \frac{P_* - P_0}{h} + \rho_w g \left[1 - \frac{\mu_w \rho_v^2}{\mu_v \rho_w^2} \right] &= 0 \\ \lambda \frac{T^0 - T_*}{L - h} - \lambda \frac{T_* - T_0}{h} + \frac{kq\rho_w}{\mu_w} \left[\frac{P_* - P_0}{h} - \rho_w g \right] &= 0 \\ P_* = f(T_*) = P_a \exp \left(A + \frac{B}{T_*} \right) & \end{aligned}$$

Eliminating the pressure and temperature from the first two equations and substituting them into the third one we finally obtain the algebraic equation for the front location

$$G(H) = 0; \quad H = h/L, \quad (6)$$

where $G(y)$ is the transcendental function; its for are given, for example, in [4].

The equation (6) has one or three roots (considering their multiplicity) and, hence, for given values of the physical parameters there exist one or three phase transition fronts.

Stability of the vertical flow

We present the solution of (2)-(4) in each low-permeability layer in the form

$$P_{\pm}(t, x, z) = P_{\pm}^s + P'_{\pm}(t, x, z), \quad T_{\pm}(t, x, z) = T_{\pm}^s + T'_{\pm}(t, x, z),$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}(t, x) = \{0, 0, \partial\eta/\partial t\}, \tag{7}$$

where $z = h + \eta(t, x)$ is the equation of the phase transition front. The solution os (7), evidently represent the perturbed solution of (5), describing the vertical flow. After substitution of (7) into (2)-(4) we get the boundary value problem for perturbations $P'_{\pm}(t, x, z)$, $T'_{\pm}(t, x, z)$. The solution of this system determines the global in time behavior of the perturbed flow, in particular, the extent of its deviation from the non-perturbed one. In this connection one may speak about stability or instability of the vertical flow. Due to the fact, that solving of the non-reduced equations for perturbations is practically impossible, it is reasonable to consider linear stability of the vertical flow with respect to infinitesimal perturbations, and also put a question how the nonlinearity influence on dynamics of these perturbations.

Linear (or normal) stability gives a tendency of exponential growth or decrease of infinitesimal perturbations of the form

$$P'_{\pm}(t, x, z) = \delta P_{\pm}(z) \exp(i \hat{\kappa} x + \hat{\sigma} t), \quad T'_{\pm}(t, x, z) = \delta T_{\pm}(z) \exp(i \hat{\kappa} x + \hat{\sigma} t),$$

$$\eta(t, x) = \hat{\eta} \exp(i \hat{\kappa} x + \hat{\sigma} t), \tag{8}$$

which obey the linearized about the vertical flow (5) equations and boundary values (2)-(4).

Behavior of perturbations (8) (their growth or decrease) is determined by the dispersion relation

$$\sigma = \sigma(\kappa), \quad \sigma = \frac{L^2}{a} \hat{\sigma}, \quad \kappa = L \hat{\kappa}$$

at real values of wave numbers κ . The expression for $\sigma(\kappa)$ is given, for example, in [4].

Interaction of stabilizing and destabilizing factors

We consider the geothermal reservoir with the following physical parameters $\mu_w = 1.478 \cdot 10^{-4}$ Pa·s, $\mu_v = 1.587 \cdot 10^{-5}$ Pa·s, $\rho_w = 888.66$ kg/m³, $\rho_v = 4.83$ kg/m³, $q = 2.04 \cdot 10^6$ J/kg, $T_0 = 450$ K, $T^0 = 538.96$ K, $P_0 = 10^6$ Pa, $P^0 = 3.62 \cdot 10^6$ Pa; $\lambda_s = 2$ W·K/m, $\lambda_w = 0.58$ W·K/m, $\lambda_v = 0.033$ W·K/m, $g = 9.8$ m/s², $m = 0.1$,

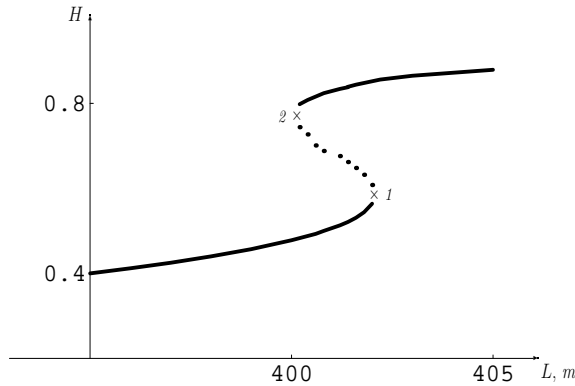


Fig. 2: Dependence of the front location H on the width of the low-permeability layer L in the geothermal reservoir of the fixed permeability $k = 6 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$; solid line denotes the stable front, \bullet is the front unstable with respect to long-wave perturbations; $\times 1$ and $2\times$ are the bifurcation points (appearance and disappearance of the pair of fronts).

$\rho_s = 2.5 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$, $C_s = 10^3 \text{ J/(K}\cdot\text{kg)}$, $C_w = 4.39 \cdot 10^3 \text{ J/(K}\cdot\text{kg)}$, $C_v = 1.8 \cdot 10^3 \text{ J/(K}\cdot\text{kg)}$ and variable permeability k and width of the low-permeable layer L .

We fix first the permeability and vary the width of the low-permeability layer. In Fig. 2 we give the bifurcation curve $H(L)$ at $k = 6 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$.

For the widths of the low-permeability layer less then $L_0 \approx 400 \text{ m}$ there exists only one stable front of phase transition. In the point $L = L_0$ (corresponds to point $2\times$ in Fig. 2) there appears one more pair of fronts, one of which (central) is necessarily unstable with respect to long-wave perturbations. At the threshold of instability of the central front this pair became double front and for $L < L_0$ cease to exist. For further increase of the width of the low-permeability layer, in the point $L = L_1$, $L_1 \approx 402 \text{ m}$ (corresponding to the point $\times 1$ in Fig. 2) the pair of fronts disappear and the only one stable front remains.

In a neighborhood of bifurcation points $2\times$ and $\times 1$ ($z = H + \varepsilon\eta$, $\varepsilon = L^2/\nu^2 = \eta_a/L$, ν and η_a are characteristic values of wave length and amplitude, correspondingly) the narrow band of weakly unstable modes are described by the nonlinear dissipative KPP equation [7]:

$$\varepsilon\alpha_f\eta^* + \varepsilon^2\beta_f\eta^{*2} + \varepsilon^2\delta_f\partial_{XX}\eta^* + \varepsilon^2\omega_f\partial_\tau\eta^* = 0, \tag{9}$$

where

$$X = \varepsilon \frac{x}{L}, \quad \eta^* = \varepsilon \frac{\eta}{L}, \quad \tau = \varepsilon \frac{a}{L^2} t,$$

and the explicit expressions of the coefficients α_f , β_f , δ_f and ω_f are not given here for the sake of brevity; the coefficient $\alpha_f = O(\varepsilon)$.

With the help of scaling transformations

$$\eta^* \rightarrow \frac{|\alpha_f|}{\varepsilon|\beta_f|}\eta^*, \quad X \rightarrow \sqrt{\varepsilon \frac{|\delta_f|}{|\alpha_f|}} X, \quad \tau \rightarrow \varepsilon \frac{|\omega_f|}{|\alpha_f|}\tau.$$

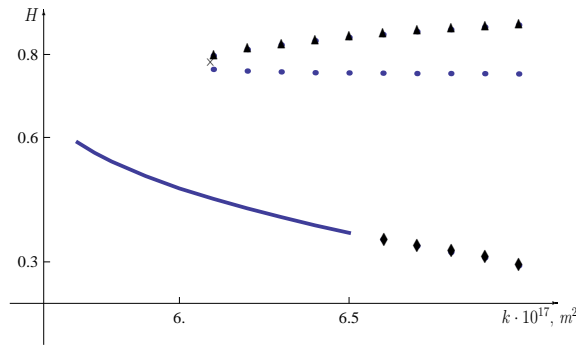


Fig. 3: Dependence of the front location H on permeability of the low-permeability layer k in the geothermal reservoir for the fixed value of its width $L = 400$ m; solid line denotes the positions of the stable front; \bullet denotes positions of the front unstable to long-wave perturbations; \blacktriangle denotes positions of the front unstable to middle-wave perturbations; \blacklozenge denotes positions of the front unstable to short-wave perturbations; \times is the bifurcation point (appearance of the new pair of fronts)

the constant coefficients in (9) can be put to ± 1 . In a neighborhood of the point $2\times$, evidently, the transformed equation (9) has the form

$$\frac{\partial \eta^*}{\partial \tau} = \pm \eta^* - \frac{\partial^2 \eta^*}{\partial X^2} - \eta^{*2}, \tag{10}$$

and in a neighborhood of the point $\times 1$ it reads

$$\frac{\partial \eta^*}{\partial \tau} = \pm \eta^* + \frac{\partial^2 \eta^*}{\partial X^2} + \eta^{*2}. \tag{11}$$

Sign "-" in (10) correspond to the upper stable branch in the right semi-vicinity of the point $2\times$, and + corresponds to the middle unstable branch. In (11) sign "-" corresponds to the lower stable branch, and sign + corresponds to the lower unstable branch in the left semi-vicinity of the point $\times 1$.

In Fig. 3 we give the bifurcation diagram $H(k)$ for fixed $L = 400$ m. For the value of the permeability less then $k = k_1 \approx 6.03 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ (k_1 corresponds to the point \times in Fig. 3) there exists only one stable front. For $k = k_1$ bifurcation takes place and appear another two plane stationary fronts of phase transition. For the growing permeability k we have the central front unstable to long-wave perturbations, the stable upper front, and also the lower front of phase transition unstable to harmonic perturbations with finite wave numbers. At the point $k \approx 6.535 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ the destabilization of the upper stationary phase transition front front takes place. The mechanism of destabilization is described in [9] and it takes place for $\kappa = \infty$. For further increasing of the permeability the left end of the interval of unstable κ (for $\kappa > 0$; for $\kappa < 0$ the right end) moves towards the point $\kappa = 0$ and the range of the unstable wave numbers enlarges.

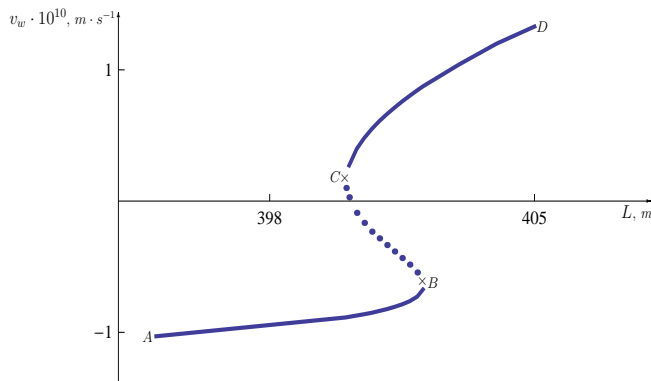


Fig. 4: Bifurcation curve in Fig. 2 in the z component of the velocity $\mathbf{v}_w = (0, v_w)^T$ – the width of the layer plane. The branches AB and CD are stable, the branch BC is subjected to long-wave instability

Conclusion and Discussion

We consider the features of formation of phase transition fronts for vertical flows in geothermal systems for fixed gradients of pressure and temperature and variable permeability and width of the geothermal layer. These features are concerned with interaction between destabilizing and stabilizing factors. The destabilizing factor is the hydrostatic instability (the water overlies the vapor) or the Rayleigh-Taylor instability. The stabilizing factor is the stream of phases across the front. The stabilizing factor prevails when the absolute value of the water velocity at the front has sufficiently large value. The new pair of fronts (one of them is necessarily unstable) arises or escapes at critical (minimal for origin and maximal for disappearance) of the absolute value of the velocity of the stream across the front. Behavior of the narrow band of modes in a neighborhood of critical points in the bifurcation diagram is discussed.

On the example of the localization of the phase transition front in dependence on the width of the geothermal layer at the fixed permeability pictured in Fig. 2 we consider the mechanism of formation of the fronts for the base vertical flow in dependence on competing factors of the Rayleigh-Taylor destabilization and stabilization by the fluid flow through the phase transition front.

On the stable branch AB of the bifurcation diagram in Fig. 4 the vertical velocity is negative, i. e. the vapor flows into the water. This is accompanied by the further condensation of the vapor. The values of the velocity on the branch AB are confined in the interval $(-1.03 \cdot 10^{-10}, -6.6 \cdot 10^{-11}) m \cdot s^{-1}$. The stream of the fluid directed upwards and its absolute velocity are enough to compensate spreading of the water downwards, against the stream. When deforming a little the phase transition front directed upwards along the stream of the fluid, and the Rayleigh-Taylor instability due to the water penetration in the vapor domain doesn't occur.

On the stable branch CD of the bifurcation diagram in Fig. 4 the vertical velocity of the water is positive, i.e. the water flows downwards in the vapor domain and evaporates. The values of the velocity on the branch CD are confined in the interval $(1.29 \cdot 10^{-11}, 1.33 \cdot 10^{-10}) \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. The stream of the fluid directed downwards and the water coming to the surface of the phase transition front cools it and as a result front moves upstairs to the domain of lower pressure. At that, the height of the water column weighing upon the front decreases, hydrostatic pressure, initiating the Rayleigh-Taylor instability, decreases, and the front remains stable. In this case the phase transition front moves against the direction of motion of the fluids (which is impossible for the interface in case of two non-miscible fluids).

On the unstable fragment of BC of the bifurcation curve in Fig. 4 the condensation of the vapor takes place, on the other part we have the water evaporation. Nevertheless, the absolute value of the stream velocity across the front is insufficient to compensate the hydrostatic Rayleigh-Taylor instability and the corresponding phase transition fronts are unstable and the instability has the long-wave character.

REFERENCES

- [1] Grant M.A. Geothermal reservoir modeling // *Geothermics*, 1983, V. 12, 251-263.
- [2] Drazin P.G. Introduction to Hydrodynamic Stability. Cambridge Univ. Press: Cambridge, 2002.
- [3] Schubert G., Straus J.M. Gravitational stability of water over steam in vapor-dominated geothermal system // *J. Geoph. Res.*, 1980, V. 85, No B11, P. 6505-6512.
- [4] Tsyarkin G.G., Il'ichev A.T. Gravitational stability of the water-vapor phase transition interface in geothermal systems // *Transport in porous media*, 2004, V.55, P. 183-199.
- [5] Rubin A., Schweitzer S. Heat transfer in porous media with phase change // *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1972, V. 15, P. 43-60.
- [6] Il'ichev A.T., Tsyarkin G.G. Catastrophic transition to instability of evaporation front in a porous medium // *European Journal of Mech. B/Fluids*, 2008, V.27, P. 665-677.
- [7] Il'ichev A.T., Tsyarkin G.G. Instabilities of uniform filtration flows with phase transition // *J. Exp. Theor. Phys.*, 2008, V.107:4, P. 699-711.
- [8] Kolmogorov, A. Petrovsky, I. Piscounov, N. (1937) Etude de l'équation de la diffusion avec croissance de la quantité de matière et son application à un problème biologique. *Moscow Univ Math Bull.*, **1**, 1–25.

- [9] Il'ichev A.T., Tsyarkin G.G. Transition to instability of the interface in geothermal systems // *European Journal of Mech. B/Fluids*, 2005, V.24, P. 491-501.

Discontinuous finite volume element methods and its applications to miscible displacement problems

Kumar Sarvesh

Indian Institute of Space Science and Technology, Kerala, India;

sarvesh@iist.ac.in

rajputsarvesh@gmail.com

Abstract

In this article, we first would like to discuss advantages of discontinuous Galerkin finite volume element methods (DGFVEMs) over the standard finite volume element methods (FVEMs). Then, we discuss applications of DGFVEMs in approximation of miscible displacement problems. The mathematical model which describe the miscible displacement of one incompressible fluid by another in a porous medium is modeled by two coupled nonlinear partial differential equations; one is pressure-velocity equation and other is concentration equation. We use a mixed FVEM for the approximation of the pressure-velocity equation and a DGFVEM for the concentration equation. Also, *a priori* error estimates for velocity, pressure and concentration will be discussed. Some Numerical experiments will be presented to substantiate the validity of the theoretical results.

Keywords: discontinuous finite volume element, *a priori* estimates, miscible displacement problems, numerical experiments.

Acknowledgements: the author would like to thank the organizers of 2nd International Conference *Supercomputer Technologies of Mathematical Modeling*, July 8-11, 2013, Yakutsk, Russia, for providing Air fare and excellent local hospitality. The author also thankful to IIST, Trivandrum for providing partial financial support and making all the necessary arrangements for attending the conference.

Introduction

Finite volume element methods (FVEM) are numerical techniques used in the approximation of partial differential equations (PDEs) like finite element methods (FEM), finite difference methods (FDM) etc. Since FVEM are conservative in nature, these methods created new interest among the researchers working in the area of fluid dynamics. In FVEM, generally two kinds of grids are used; one is primal and another one is dual grid. The test spaces used in FVEM are mostly piecewise constants and which make the FVEM computationally less expensive compared to finite element method. Unfortunately, the error analysis of FVEM depends on FEM analysis. Since piecewise constants are used, we need more regularity on the exact solution or the given data in order to derive optimal L^2 estimates compared to FEM. For example, for simple

linear non-homogeneous elliptic problems in two dimensional domain , for optimal L^2 estimates either we need the exact solution in H^3 or the source term is globally in H^1 , for more details see [6, 9].

Also, because of local mesh adaptivity and many other features, discontinuous Galerkin (DG) methods are popular for the numerical approximation of PDEs. The best part of DG methods is that in DG we do not impose any continuity criteria on the finite dimensional spaces whereas we are forced to impose some inter-element continuity in standard FEM or even non-conforming FEM. For more details regarding DG methods we refer to [1, 2] and references therein.

In this article, we have combined DG methods with finite volume approach and this combination we refer as discontinuous Galerkin finite volume element methods. Like DG methods are well developed in the literature with finite element approach but DG methods are still not very well developed for finite volume approach. For quick survey on DGFVEM, kindly see [3, 10, 13]. In [10], authors have discussed optimal H^1 and L^2 with the assumption that the source term is locally in H^1 . We note that, as far as optimal L^2 estimates are concerned, in DGFVEM we need less regularity assumption compared to standard FVEM. Moreover, support of the control volume used in DGFVEM is small and lie completely inside the triangle in which they belongs which is not the case in standard FVEM see Figure 1 and Figure 2.

The main ingredient of this article are as follows: while the Section 1 is introductory in nature, in Section 2 we discuss DGFVE approximation for the simple elliptic problem with the regularity issues. Section 3, we discuss the application of DGFVE developed in Section 2 for incompressible miscible displacement problem in porous media. Moreover, some numerical experiments are also presented in Section 2 as well as in Section 3 to support the theoretical error estimates.

FVE approximation for elliptic problem.

Preliminaries

Consider the following elliptic problem: Given f , find u such that

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (K\nabla u) &= f && \text{in } \Omega, \\ u &= 0 && \text{on } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{1}$$

where Ω is a bounded, convex polygonal domain in \mathbb{R}^2 with boundary $\partial\Omega$ and $K = (k_{ij}(x))_{2 \times 2}$ is a real valued, symmetric and uniformly positive definite matrix. Let \mathcal{T}_h be a regular, quasi-uniform triangulation of $\bar{\Omega}$ into closed triangles T with $h = \max_{T \in \mathcal{T}_h} (h_T)$. The dual partition \mathcal{T}_h^* corresponding to the primal partition \mathcal{T}_h is shown in Figure 1. The union of these sub-triangles form the dual partition \mathcal{T}_h^* of $\bar{\Omega}$. For the finite volume element approximation of (1), we now define the finite dimensional trial

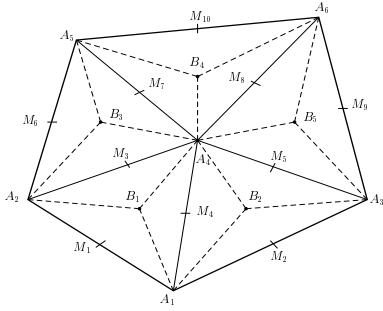


Figure 1: Dual elements in DGFVEM

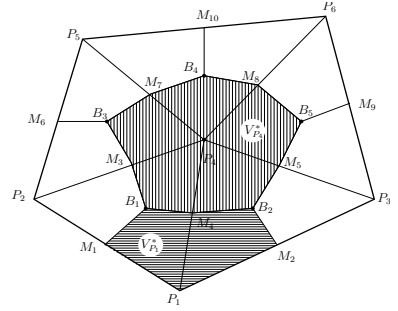


Figure 2: Dual elements in standrad FVEM

and test spaces V_h and W_h on \mathcal{T}_h and \mathcal{T}_h^* , respectively.

$$V_h = \{v_h \in L^2(\Omega) : v_h|_T \in P_1(T) \quad \forall T \in \mathcal{T}_h\},$$

$$W_h = \{w_h \in L^2(\Omega) : w_h|_{T^*} \in P_0(T^*) \quad \forall T^* \in \mathcal{T}_h^*\},$$

Weak and finite volume element approximation

Let $V(h) = V_h + H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. For connecting the trial and test spaces, define the transfer operator $\gamma : V(h) \rightarrow W_h$ as follows:

$$\gamma v|_{T^*} = \frac{1}{h_e} \int_e v|_{T^*} ds, \quad T^* \in \mathcal{T}_h^*, \tag{2}$$

h_e is the length of the edge e .

Multiplying (1) by $w_h \in W_h$, integrating over the control volumes $T^* \in \mathcal{T}_h^*$, applying Gauss’s divergence theorem and summing up over all the control volumes, we obtain

$$- \sum_{T^* \in \mathcal{T}_h^*} \int_{\partial T^*} K \nabla u \cdot \mathbf{n} w_h ds = (f, w_h) \quad \forall w_h \in W_h, \tag{3}$$

where \mathbf{n} denotes the outward unit normal vector to the boundary ∂T^* of T^* . Let $T_j^* \in \mathcal{T}_h^*$ ($j = 1, 2, 3$) be the three triangles in $T \in \mathcal{T}_h$, (see Figure 3). Then, for $w_h \in W_h$

$$\begin{aligned} \sum_{T^* \in \mathcal{T}_h^*} \int_{\partial T^*} K \nabla u \cdot \mathbf{n} w_h ds &= \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \sum_{j=1}^3 \int_{\partial T_j^*} K \nabla u \cdot \mathbf{n} w_h ds \\ &= \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \sum_{j=1}^3 \int_{A_{j+1} B A_j} K \nabla u \cdot \mathbf{n} w_h ds + \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial T} K \nabla u \cdot \mathbf{n} w_h ds, \end{aligned} \tag{4}$$

where, $A_4 = A_1$. Now using the fact that $[K \nabla u] = 0$, the weak formulation for (1) read as follows: Find $u \in H^2$ such that

$$A_h(u, v_h) = (f, \gamma v_h) \quad \forall v_h \in V_h. \tag{5}$$

Now, the discontinuous Galerkin finite volume element schemes corresponding to (5) are defined as: Find $u_h \in V_h$ such that

$$A_h(u_h, v_h) = (f, \gamma v_h) \quad \forall v_h \in V_h, \tag{6}$$

where

$$A_h(\phi_h, \psi_h) = A_1(\phi_h, \psi_h) + \theta \sum_{e \in \Gamma} \int_e [\gamma \phi_h] \cdot \langle K \nabla \psi_h \rangle ds - \sum_{e \in \Gamma} \int_e [\gamma \psi_h] \cdot \langle K \nabla \phi_h \rangle ds + \sum_{e \in \Gamma} \int_e \frac{\alpha}{h_e^\beta} [\phi_h] \cdot [\psi_h] ds \quad \forall \phi_h, \psi_h \in V_h,$$

where $\theta \in [-1, 1]$, $\langle \cdot \rangle$ and $[\cdot]$ denote usual average and jump and

$$A_1(\phi_h, \psi_h) = - \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \sum_{j=1}^3 \int_{A_{j+1} B A_j} (K \nabla \phi_h \cdot \mathbf{n}) \gamma \psi_h ds. \tag{7}$$

Here α and β are penalty parameters that will be determined later.

Note the the DGFVE formulation (6) is consistent with the weak formulation (5).

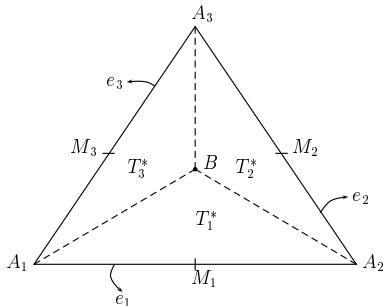


Figure 3: Dual elements in triangle

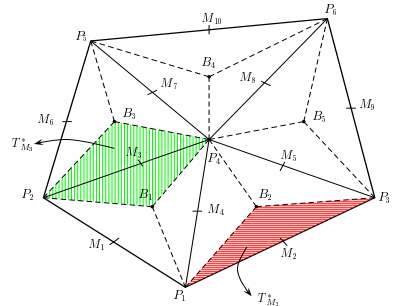


Figure 4: Dual elements in mixed FVEM

Error estimates

Define a norm $||| \cdot |||$ on $V(h)$ by

$$|||v|||^2 = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} |\nabla v|_{0,T}^2 + \sum_{e \in \Gamma} \frac{1}{h_e^\beta} \int_e [v]^2 ds, \tag{8}$$

The bilinear form $A_h(\cdot, \cdot)$ is coercive and bounded in the following sense, see [10].

Coercivity of $A_h(\cdot, \cdot)$: There exists a positive constant C independent of h such that for α large enough and h small enough

$$A_h(\phi_h, \phi_h) \geq C |||\phi_h|||^2 \quad \forall \phi_h \in V_h. \tag{9}$$

Boundedness of $A_h(\cdot, \cdot)$: There exists a constant C independent of h such that

$$|A_h(\phi_h, \psi_h)| \leq C \|\phi_h\| \|\psi_h\| \quad \forall \phi_h, \psi_h \in V_h. \tag{10}$$

Let $u_I \in V_h$ be an interpolant of u , which has the following approximation properties:

$$|u - u_I|_{s,T} \leq Ch_T^{2-s} \|u\|_{2,T} \quad \forall T \in \mathcal{T}_h, \quad s = 0, 1. \tag{11}$$

Using boundedness, coercivity and properties of above interpolant, we have the following error estimates in H^1 norm, for a proof we refer to [13].

Theorem 2.1: Let $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ and $u_h \in V_h$ be the solutions of (1) and (6), respectively. Then there exists a positive constant C independent of h such that

$$\|u - u_h\| \leq Ch \|u\|_2. \tag{12}$$

Before proving the optimal L^2 estimates, we state the following lemma which plays a key role in deriving the L^2 estimates. The proof of this lemma is simple and based on the properties of transfer operator γ Green’s Theorem. for the proof, see [10]

Lemma 2.1: Let $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ and $u_h \in V_h$ be the solutions of (1) and (6), respectively. Then there exists a positive constant C independent of h such that for $\phi_h \in V_h$

$$|A(u - u_h, \phi_h) - A_h(u - u_h, \phi_h)| \leq Ch^2 \left[\|u\|_2 + \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|f\|_{1,T}^2 \right)^{1/2} \right] \|\phi_h\|_1. \tag{13}$$

Now, using duality arguments and the above Lemma we have the following optimal L^2 estimates.

Theorem 2.2: Let $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ and $u_h \in V_h$ be the solutions of (1) and (6), respectively. There exists a positive constant C independent of h such that

$$\|u - u_h\| \leq Ch^2 \left[\|u\|_2 + \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|f\|_{1,T}^2 \right)^{1/2} \right]. \tag{14}$$

Numerical experiments

For our numerical experiments, we have considered the following problem:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (K \nabla u) &= f && \text{in } \Omega, \\ u &= 0 && \text{on } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{15}$$

where $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, $K = \begin{pmatrix} 1 + x^2 & 0 \\ 0 & 1 + y^2 \end{pmatrix}$ and f chosen in such a way that the exact solution is $u = xy(x - 1)(y - 1)$. The domain Ω is divided into regular uniform

closed triangles. We will investigate the order of convergence for $\theta = -1$, $\theta = 0$ and $\theta = 1$ in the broken norm $\|\cdot\|$ and L^2 -norm.

Convergence in the broken H^1 -norm : We take $\beta = 1$ and $\alpha = 10$ for all values of $\theta \in [-1, 1]$. The order of convergence approximately is 1 for $\theta = -1, 0, 1$, which confirms the theoretical order of convergence derived in Theorem 2.1.

Convergence in the L^2 -norm : The computed order of convergence for $\theta = -1$ is approximately 2 which matches with the theoretical estimates. As per our analysis, in order to obtain optimal order of convergence for $\theta = 0, 1$, we need $\beta = 3$. But our computation shows that even with $\beta = 1$ for $\theta = 0, 1$, we are able to obtain optimal convergence in L^2 norm.

Application to miscible displacement problems

Model problem

A mathematical model describing miscible displacement of one incompressible fluid by another in a horizontal porous medium reservoir $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ with boundary $\partial\Omega$ of unit thickness over a time period of $J = (0, T]$ is given by

$$\mathbf{u} = -\frac{\kappa(x)}{\mu(c)} \nabla p \quad \forall (x, t) \in \Omega \times J, \quad (16)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = q \quad \forall (x, t) \in \Omega \times J, \quad (17)$$

$$\phi(x) \frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (D(\mathbf{u}) \nabla c - \mathbf{u}c) = g(x, t, c) = (\tilde{c} - c)q \quad \forall (x, t) \in \Omega \times J, \quad (18)$$

with boundary conditions

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \forall (x, t) \in \partial\Omega \times J, \quad (19)$$

$$(D(\mathbf{u}) \nabla c - \mathbf{u}c) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \forall (x, t) \in \partial\Omega \times J, \quad (20)$$

and initial condition

$$c(x, 0) = c_0(x) \quad \forall x \in \Omega, \quad (21)$$

where $\mathbf{u}(x, t)$ and $p(x, t)$ are, respectively, the velocity and pressure of the fluid mixture, c is the concentration of the fluid, \tilde{c} is the concentration of the injected fluid, $\mu(c)$ is the concentration dependent viscosity of the mixture, $\kappa(x)$ is the 2×2 permeability tensor of the medium, $q(x, t)$ is the external source/sink term that accounts for the effect of injection and production wells and $\phi(x)$ is the porosity of the medium. Further, $D(\mathbf{u})$ is the diffusion-dispersion tensor, see [7]. Numerical approximation of miscible displacement problems have been discussed in [5, 7, 8].

Finite volume element formulation

We approximate concentration by DGFVEM and concentration depends on the velocity not on pressure and hence in order to obtain better approximation for the concentration, we need a better approximation of the velocity compared to the pressure. As it is well known that mixed methods are more suitable for direct computation of the velocity. Therefore, for the good approximation for pressure equation we employed mixed finite volume element methods. Since the construction of the control volume in mixed FVEM is similar to DGFVEM see Figures 1 and 4, we believe that the combination of DGFVEM with mixed FVEM would be better choice as far as miscible displacement problems are concerned.

The trial function spaces U_h and W_h associated with the approximation of velocity and pressure respectively be the lowest order Raviart-Thomas space for triangles defined by

$$U_h = \{\mathbf{v}_h \in U : \mathbf{v}_h|_T = (a + bx, c + by) \quad \forall T \in \mathcal{T}_h\},$$

$$W_h = \{w_h \in W : w_h|_T \text{ is a constant } \forall T \in \mathcal{T}_h\},$$

where $W = L^2(\Omega)/\mathbb{R}$ and $U = \{\mathbf{v} \in H(\text{div}; \Omega) : \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ on } \partial\Omega\}$. Let $\tilde{\mathcal{T}}_h^*$ denote the dual partition of the primal grid which consists of interior quadrilaterals and boundary triangles. For the construction of the dual grid $\tilde{\mathcal{T}}_h^*$ we refer to [4]. In general, let T_M^* (see Figure 4) denote the dual element corresponding to the mid-side node M .

$$V_h = \left\{ \mathbf{v}_h \in (L^2(\Omega))^2 : \mathbf{v}_h|_{T_M^*} \text{ is a constant vector } \forall T_M^* \in \tilde{\mathcal{T}}_h^* \text{ and } \mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ on } \partial\Omega \right\},$$

where T_M^* denote the dual element corresponding to the mid-side node M .

the mixed FVE approximation corresponding to (1)-(2) can be written as: find $(\mathbf{u}_h, p_h) : \bar{J} \rightarrow U_h \times W_h$ such that for $t \in (0, T]$

$$(\kappa^{-1} \mu(c_h) \mathbf{u}_h, \gamma_h \mathbf{v}_h) - \sum_{i=1}^{N_m} \mathbf{v}_h(M_i) \cdot \int_{\partial T_{M_i}^*} w_h \mathbf{n}_{T_{M_i}^*} ds = 0 \quad \forall \mathbf{v}_h \in U_h, \quad (22)$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{u}_h, w_h) = (q, w_h) \quad \forall w_h \in W_h, \quad (23)$$

where c_h is an DGFVE approximation to c .

Find $c_h(t) \in M_h$ such that

$$\begin{aligned} \left(\phi \frac{\partial c_h}{\partial t}, \gamma z_h \right) + A_h(\mathbf{u}_h^M; c_h, z_h) &= (g(c_h), \gamma z_h) \quad \forall z_h \in M_h, \quad (24) \\ c_h(0) &= c_{0,h}. \end{aligned}$$

Here, \mathbf{u}_h^M is the ‘‘cut-off’’ function of \mathbf{u}_h see [11] and $c_{0,h}$ is Ritz projection of c_0 and $A_h(\mathbf{v}; \cdot, \cdot) : M(h) \times M(h) \rightarrow \mathbb{R}$ is similar to the one defined in Section 2.

Error estimates

In [8], author has discussed the semi-discrete scheme and derived the estimates for velocity and pressure. By following the analysis of [8] and replace time derivative by Euler backward scheme, the following theorem can be derived easily.

Theorem 3.1: Let c and c_h be the solutions of (18) and (24), respectively, and let $c_h(0) = c_{0,h} = R_h c(0)$. Then, for sufficiently small h , there exists a positive constant $C(T)$ independent of h but dependent on the bounds of κ^{-1} and μ such that

$$\max_{0 \leq n \leq N} \|c(t_n) - c_h^n\| \leq C[h + \Delta t]$$

Theorem 3.2: Assume that the triangulation \mathcal{T}_h is quasi-uniform. Let (\mathbf{u}, p) and (\mathbf{u}_h, p_h) , respectively, be the solutions of (1)-(2) and (22)-(23) and let $c_h(0) = c_{0,h} = R_h c(0)$. Then, for sufficiently small h , there exists a positive constant $C(T)$ independent of h but dependent on the bounds of κ^{-1} and μ such that

$$\max_{0 \leq n \leq N} \|\mathbf{u}(t_n) - \mathbf{u}_h^n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|p(t_n) - p_h^n\|^2 \leq C[h + \Delta t]$$

Numerical Experiments

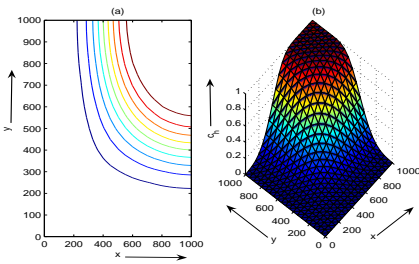
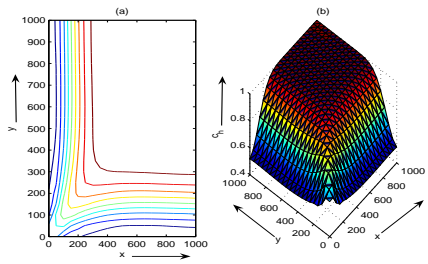
For our numerical experiments, we consider (1)-(21), with $q = q^+ - q^-$ and $g(x, t, c) = \bar{c}q^+ - cq^-$, where \bar{c} is the injection concentration and q^+ and q^- are the production and injection rates, respectively.

For the test problems, we have taken the data from [12]. $\Omega = (0, 1000) \times (0, 1000)$ ft² and $J = [0, 3600]$ days, viscosity of oil is $\mu(0) = 1.0$ cp. The injection well is located at the upper right corner (1000, 1000) with the injection rate $q^+ = 30$ ft²/day and injection concentration $\bar{c} = 1.0$. The production well is located at the lower left corner with the production rate $q^- = 30$ ft²/day and $c(x, 0) = 0$. In the numerical simulation for spatial discretization we choose in 20 divisions on both x and y axes. For time discretization, we take $\Delta t_p = 360$ days and $\Delta t_c = 120$ days.

Test 1: The permeability κ is 80 and $\phi = .1$ and the mobility ratio between the resident and injected fluid is $M = 1$. Further, we assume that the molecular diffusion is $d_m = 1$ and dispersion coefficients are zero.

The surface and contour plots for the concentration at $t = 3$ and $t = 10$ years are presented in Figure 5 and Figure 6, respectively. Since only molecular diffusion is present and viscosity is also independent of the velocity, Figure 6, shows that the velocity is radial and the contour plots for the concentration is almost circular until the invading fluid reaches the production well. Figure 6 shows that when these plots are reached at production well, the invading fluid continues to fill the whole domain until $c = 1$.

Order of Convergence: In order to verify our theoretical results we also compute the order of convergence for the concentration. We compute the order of convergence in L^2 norm. To discretize the time interval $[0, T]$, we take uniform time step $\Delta t = 360$ days for pressure and concentration equation. The computed order of convergence with respect to

Figure 5: At $t=3$ yearsFigure 6: At $t=10$ years

the spatial domain is 2 for Test 1. Note that the computed order of convergence matches with the theoretical order of convergence.

REFERENCES

- [1] D.N. Arnold: An interior penalty finite element method with discontinuous elements. *SIAM J. Numer. Anal.* 18,742-760 (1982).
- [2] D. N. Arnold, F. Brezzi, B. Cockburn and L. D. Marini: Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic problems. *SIAM J. Numer. Anal.* 39,1749-1779 (2002).
- [3] S.H. Chou and X.Ye: Unified analysis of finite volume methods for second order elliptic problems. *SIAM J. Numer. Anal.* 45,1639-1653 (2004).
- [4] S. H. Chou, D. Y. Kwak and P. Vassilevski: Mixed covolume methods for elliptic problems on triangular grids. *SIAM J. Numer. Anal.* 35,1850-1861 (1998).
- [5] J. Douglas Jr., R. E. Ewing and M. F. Wheeler: A time-discretization procedure for a mixed finite element approximation of miscible displacement in porous media. *RAIRO Anal. Numér.* 17, 249-265 (1983).
- [6] R. E. Ewing, T. Lin and Y. Lin : On the accuracy of the finite volume element method based on piecewise linear polynomials. *SIAM J. Numer. Anal.* 39, 1865-188 (2002).
- [7] R. E. Ewing, T. F. Russell and M. F. Wheeler: Convergence analysis of an approximation of miscible displacement in porous media by mixed finite elements and a modified method of characteristics. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 47, 73-92 (1984).
- [8] S. Kumar: A mixed and discontinuous Galerkin finite volume element method for incompressible miscible displacement problems in porous media. *Numer. Methods Partial Differential Equations* 28, 1354-1381 (2012).

- [9] S. Kumar, N. Nataraj and A. K. Pani: Finite volume element method for second order hyperbolic equations. *Int. J. Numerical Analysis and Modeling* 5, 132-151 (2008).
- [10] S. Kumar, N. Nataraj and A.K. Pani: Discontinuous Galerkin finite volume element methods for second order linear elliptic problems. *Numer. Methods Partial Differential Equations* 25, 1402-1424 (2009).
- [11] S. Sun and M.F. Wheeler: Discontinuous Galerkin methods for coupled flow and reactive transport problems. *App Numer Math* 52, 273-298 (2005).
- [12] H. Wang, D. Liang, R. E. Ewing, S. L. Lyons and G. Qin: An approximation to miscible fluid flows in porous media with point sources and sinks by an Eulerian-Lagrangian localized adjoint method and mixed finite element methods. *SIAM J. Sci. Comput.* 22,561-581 (2000).
- [13] X. Ye: A new discontinuous finite volume method elliptic problems. *SIAM J. Numer. Anal.* 42,1062-1072 (2004).

Compressible Flow Simulation of Aerospace Applications using High Performance Computing

Vikas Kumar¹, Sreekanth Raghunath², Mohan Labade¹, Sanjay Kumar², Supriyo Paul¹, Sumit Kumar²

¹*Centre for Development of Advanced Computing, Pune University Campus, Pune, India;*

²*Zeus Numerix, ISquareIT Campus, Rajiv Gandhi Infotech Park, Hinjwadi, Pune, India;*

Abstract

High performance computing plays a great role in solving various computational fluid dynamics problem encountered in aerospace applications. It helps in reducing computation time for solving compressible flow problems encountered in stator and rotor of an axial flow compressor. The correct prediction of stall and surge helps an engineer to achieve better efficiency of an axial flow compressor, which is used in a gas turbine engine. CFD simulation studies have been conducted using a density based compressible flow solver to analyze the flow behavior of NASA rotor 37. A scale up study was conducted and the use of High Performance Computing (HPC) reduced computation time of CFD simulation studies.

Acknowledgements: the authors are grateful to Centre for Development of Advanced Computing (C-DAC), Pune and Zeus Numerix, Pune for providing facilities to carry out the research work. The authors are grateful to Gas Turbine Enabling Technology (GATET) initiative and Gas Turbine Research Establishment (GTRE) for funding the research work. The authors are also grateful to Prof. G.R.Shevare, IIT, Bombay for providing technical guidance for carrying out the research work.

Introduction

Most of the aeronautic configurations involve modeling of fine geometry aspects, resulting in large problem sizes. Although the type of physical modeling still remains mostly Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS), the major trend is to move towards Unsteady RANS and even Detached Eddy Simulations (DES) or Large Eddy Simulations (LES) in order to get more accurate results, leading to a requirement of unprecedented amounts of computational resources. High Performance Computing helps to tackle simulations with very large number of mesh points (requiring a large amount of computing power and memory). This paper describes CFD validation studies carried out for solving internal flow problems such as those encountered in turbomachinery flows.

Governing Equations

In the turbomachinery flows, the fluid motion is internal to the domain and compressible in nature. Compressible flow is generally defined as a flow where density varies with respect to change in pressure. This is in contrast to the incompressible flow where the density is constant throughout the domain. Obviously, in real life every fluid is compressible to an extent. A flow with Mach number (M) greater than 0.3 ($M > 0.3$) is generally considered as compressible.

There are three types of flow [1]

- Subsonic Flow ($M < 1$)
- Transonic Flow ($M \sim 1$)
- Supersonic Flow ($M > 1$)

The transonic flow occurs due to mixing of subsonic and locally supersonic flow in the domain of interest. The governing equations [1,2] for the compressible flow in an inertial frame of reference are given by,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \oint_S \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \mathbf{v} dV + \oint_S (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \bar{\mathbf{I}}) \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho E dV + \oint_S (\rho \mathbf{v} H) \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (3)$$

where, the total energy per unit volume is,

$$E = e + \frac{v^2}{2}. \quad (4)$$

And the enthalpy is given by,

$$H = h + \frac{v^2}{2}. \quad (5)$$

Equations 1-3 are for conservation of mass, momentum and energy respectively.

When the flow domain is a rotating one, it is often more convenient to consider the system from a rotating frame of reference. The above equations in a rotating frame of reference take the form [2]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \oint_S \rho \mathbf{w} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \mathbf{w} dV + \oint_S (\rho \mathbf{w} \otimes \mathbf{w} + p \bar{\mathbf{I}} - \bar{\boldsymbol{\tau}}) \cdot d\mathbf{S} = \quad (7)$$

$$\int_V [\mathbf{f}_e - 2\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{w} - \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})] dV \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho E^* dV + \oint_S (\rho \mathbf{w} I - k \nabla T - \bar{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{w}) \cdot d\mathbf{S} = \int_V (\rho \mathbf{f}_e \cdot \mathbf{w}) dV \quad (9)$$

$$p = f(\rho, e) \quad (10)$$

where, \mathbf{r} and $\boldsymbol{\omega}$ are radial distance and angular velocity respectively. In equation 7, the terms $2\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{w}$ and $\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})$ represent the coriolis force and the centrifugal force respectively. The total energy E is given by,

$$E^* = e + \frac{w^2}{2} - \frac{u^2}{2} = E - \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}. \quad (11)$$

The rothalpy is defined as,

$$I = h + \frac{w^2}{2} - \frac{u^2}{2} = E - \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}, \quad (12)$$

where, h is the enthalpy of the system with $\mathbf{u} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$ and $\mathbf{v} = \mathbf{u} + \mathbf{w}$.

Simulation Methodology

Turbulence Modelling

Most turbomachinery flows are turbulent in nature. To capture the turbulent effects directly from the Navier-Stokes equations, the grid resolution would need to be extremely high thus increasing the computational cost. To reduce the computation, the Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) equations [1] are used to model the turbulent flow. In RANS scheme one needs to further model the Reynolds stress,

$$R_{ij} = \overline{v'_i v'_j} = - \left[2\nu_t S_{ij} - \frac{2}{3} K \delta_{ij} \right], \quad (13)$$

where, v' is the fluctuating part of the velocity, S_{ij} is the mean rate of strain tensor, ν_t is the turbulent eddy viscosity, K is the turbulent kinetic energy, and δ_{ij} is the Kronecker delta. In this work, the Spalart-Allmaras [1, 3] model was used in the numerical simulation.

Numerical Scheme

The system of equations is solved using the Advection Upstream Splitting Method (AUSM). In this scheme inviscid convective and pressure flux terms are treated separately. This scheme is suitable for very low subsonic to high supersonic flows. AUSM scheme also has excellent shock-capturing properties and give very accurate results for a wide variety of problems.

Validation Case Studies

The CFD simulation studies have been conducted using a finite volume structured CFD solver (CFDExpert™). It is necessary for any CFD solver to conform to accepted level of accuracy for known results. Below three validation cases using CFDExpert™ are reported:

1. Converging-Diverging (C-D) nozzle
2. Sajben Duct
3. NASA Rotor-37

Converging-Diverging (C-D) nozzle

The Converging-Diverging (C-D) nozzle [4] case is a validation case involving the flow of inviscid, isothermal air through the nozzle. This is a widely used classic one-dimensional, steady, compressible internal flow problem.

The nature of the flow is determined by the exit static pressure (p_{exit}). Three values of p_{exit} have been examined which result in three types of flows:

1. subsonic, isentropic flow ($p_{exit}/p_t = 0.89$)
2. supersonic flow with a normal shock in the diffusing section ($p_{exit}/p_t = 0.75$)
3. supersonic, isentropic flow ($p_{exit}/p_t = 0.16$)

where, p_t is the total pressure in the nozzle. The flow conditions used are described in Table 1. The plenum total pressure and temperature are assumed to be constant.

| | | |
|--------------------------|----------|---------------|
| Plenum total pressure | 1 psi | 6894.757 Pa |
| Plenum Total Temperature | 100 R | 55.5556 K |
| Exit Static Pressure | 0.89 psi | 6136.33373 Pa |
| | 0.75 psi | 5171.06775 Pa |
| | 0.16 psi | 1103.16112 Pa |

Table 1: Flow conditions for C-D nozzle validation

Geometry and Grid

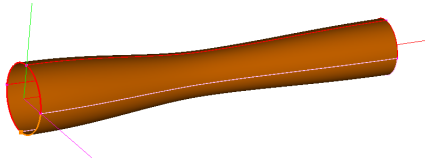


Fig. 1: Geometry of C-D nozzle

The geometry is an axi-symmetric converging-diverging duct. Figure 1 shows a solid model of the nozzle. It has an area of 2.5 in^2 at the inflow ($x = 0 \text{ in}$), an area of 1 in^2 at the throat ($x = 5 \text{ in}$), and an area of 1.5 in^2 at the exit ($x = 10 \text{ in}$). The nozzle area (in in^2) varies according to the relation¹ given below:

$$Area = \begin{cases} 1.75 - 0.75 \cos([0.2x - 1] \pi), & \text{for } x < 5.0 \\ 1.25 - 0.25 \cos([0.2x - 1] \pi), & \text{for } x > 5.0 \end{cases} \quad (14)$$

Using the above function a 2-D structured mesh is generated, consisting of 25272 cells. The mesh is shown in Fig. 2.

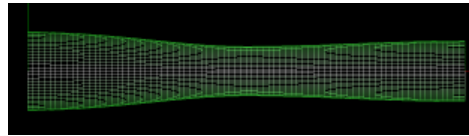


Fig. 2: Mesh of C-D nozzle

Boundary Conditions and Numerical Details

The inflow boundary (on the left side in Fig. 2) is subsonic with constant total pressure, total temperature, and flow angles. The outflow boundary (on the right side in Fig. 2) imposes the static pressure for a subsonic outflow.

The initial conditions for the CFD simulations are obtained from the total pressure (6894.757 Pa) and total temperature (55.5556 K) of the plenum with the assumption of an inflow at Mach number of 0.2.

Convergence was determined by monitoring the decline of the L2 norm of the residual. A levelling-out of the logarithmic value of the L2 norm suggested iterative convergence. Convergence was also determined by monitoring the throat Mach number and recovery and the exit Mach number and recovery until those values no longer significantly changed.

¹The literature for C-D nozzle provides all the data in FPS units. Therefore this relationship is provided as such.

Results and Discussions

For the three conditions, as mentioned above, covering the subsonic, transonic and supersonic flow regimes, the converged results of pressure and Mach number distribution were compared with literature data and these results are presented below in Fig. 3. As observed from the above figures, the data obtained in the current study agreed well with the data reported in literature.

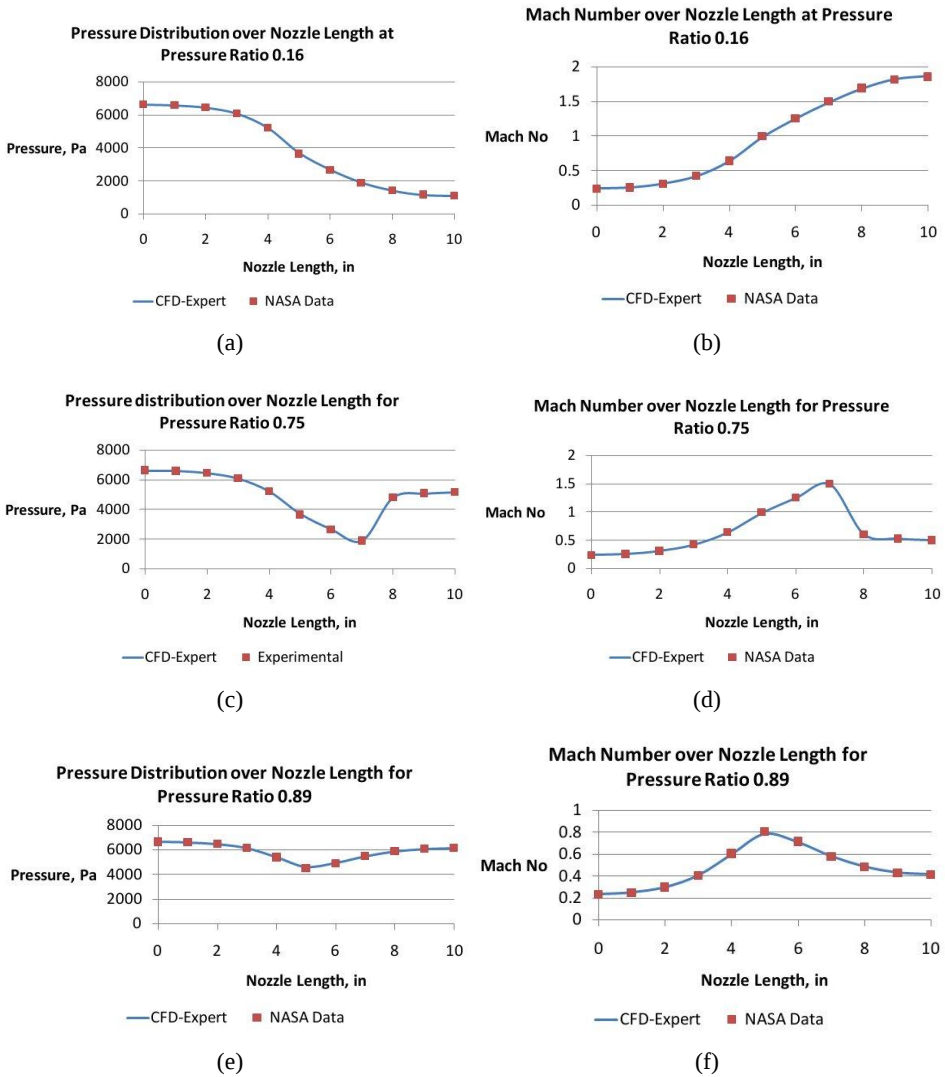


Fig. 3: The pressure and Mach number distribution over the nozzle length at various pressure ratios.

Sajben Duct

This validation study examines the use of CFDExpert's RANS solver for simulating viscous transonic flow through a converging-diverging diffuser [5,6] with adverse pressure gradients and shock-induced separation. The simulation results have been compared with experimental data obtained by Sajben et al [6].

Geometry and Grid

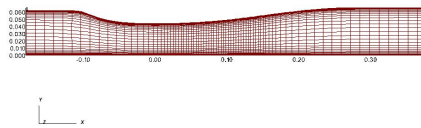


Fig. 4: Mesh of Sajben duct

The geometry and grid of the diffuser is shown in Fig. 4. The structured grids ($80 \times 50 \times 4 = 16000$ cells) have been used.

Boundary Conditions and Numerical Details

At the inlet (on the left in Fig. 4), a total pressure based inflow boundary condition was imposed based on total pressure of 19.5 psi (134447.76 Pa) and total temperature of 500 R (277.78 K). The static pressure outflow boundary condition at the outlet (on the right in Fig. 4) was imposed 14.1 psi (97216.08 Pa) as the static pressure. The upper and lower boundaries were given as no-slip wall boundary condition and the side walls were modeled as axi-symmetric boundaries.

A steady simulation, with a 2^{nd} order AUSM numerical scheme and Least Squares gradient calculation formulation is used. Menter-SST is used as the turbulence model.

The simulation has been run till the L2 norm values of the mass residue shows a convergent trend. The plot is shown in Fig. 5.

Results and Discussions

The CFD simulation results obtained from the present investigations are compared against the experimental results reported in literature. These results are shown in the Fig. 6 and Fig. 7. In Fig. 6, the X-axis of the plot is X distance from the origin, normalized against the height at the throat of the diffuser (H_{thr}) and on the Y axis is the distribution of static pressures on the top and bottom walls, respectively.

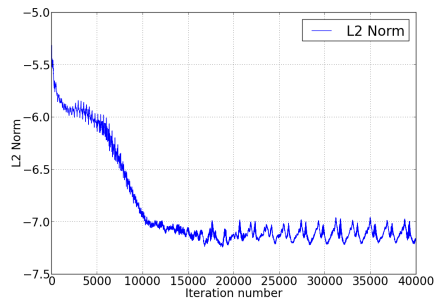


Fig. 5: L2 norm of the mass residue plot obtained from CFDExpert

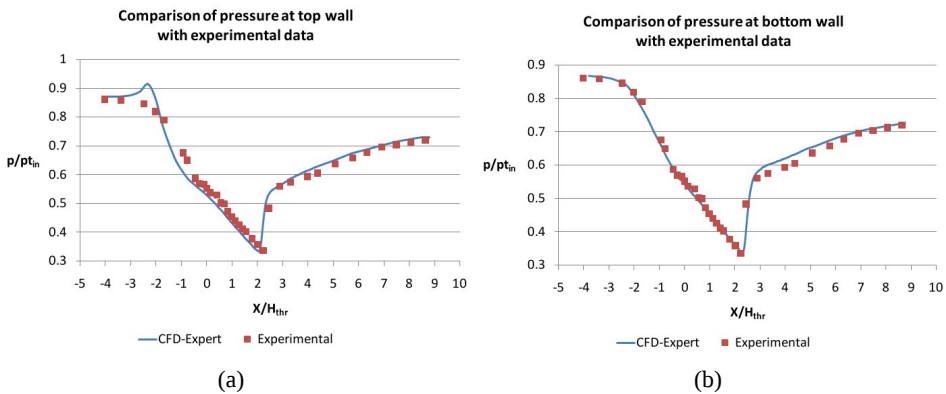


Fig. 6: Comparison of Pressure data obtained from CFD-Expert with the Experimental Data on the (a) top and (b) bottom wall of Sajben Duct

In Fig. 7, the velocity profiles at various X -locations (called *stations*) along the length of the diffuser are plotted as a function of the normalized distance from the bottom to the top wall (y). The four stations are located at $x = 0.127\text{m}$, 0.2032m , 0.2794 , and 0.3302m . The y distance is normalized against the local height of the diffuser (H_{local}).

The Mach number distributions in the domain as obtained by Mohler and from the current investigations are presented in Fig. 8. From these plots, it can be seen that the results from current investigations matched well with the experimental data as presented in literature.

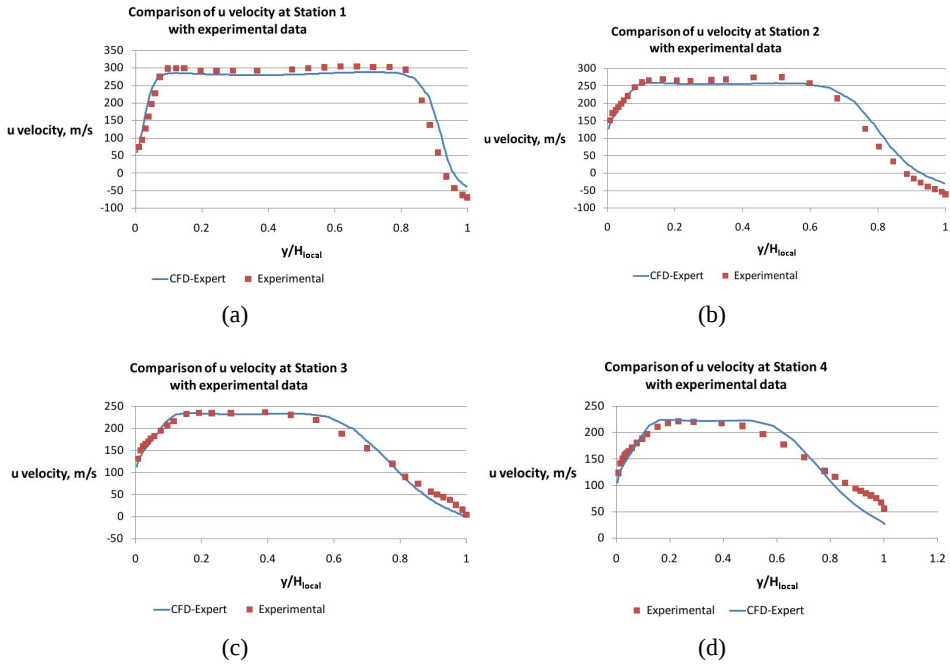


Fig. 7: Comparison of u-velocity obtained from CFD-Expert with the Experimental Data at Stations 1 (a), 2 (b), 3 (c) and 4 (d) of Sajben Duct

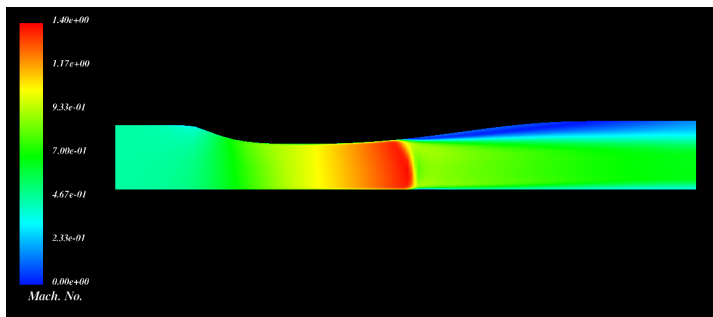
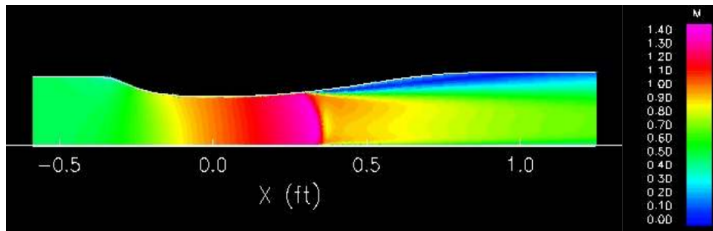


Fig. 8: Mach number distributions in the domain as obtained by Mohler (a) and with CFDExpert (b).

NASA Rotor 37

The complexity of running a CFD simulation over a stage of an axial compressor is mainly because, work is being done on the fluid by the compressor. This effect is hard to simulate and capture accurately using normal practices in CFD. Steady-state, compressible flow simulations have been carried out on a single passage of NASA Rotor 37 [8, 9, 10], as a first step towards establishing the simulation methodology and validating the CFD model for turbo-machinery simulations. The CFD model has been validated for a few design points against experimental data. A brief description of the methodology adopted and analysis of results obtained are presented in the following sections.

Geometry and grid details

The geometry for the Rotor 37 grid has been obtained from literature. This provides us with a set of coordinates for various sections of the blade. These can be put together to obtain the entire blade surface and thus the entire rotor surface. Rotor 37 consists of 36 blades arranged over the hub. By the usage of periodic boundary condition, a single passage between two blade surfaces is considered sufficient to obtain the results for the entire rotor. The periodic boundary takes advantage of the periodicity in the flow field that exists in the rotor. Thus the domain consists of a single passage with the blade surfaces on either side and the corresponding downstream and upstream passages.

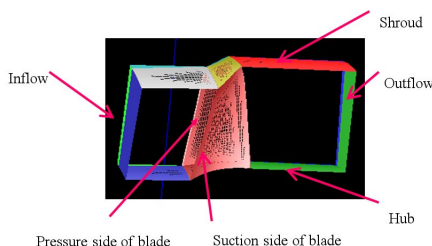


Fig. 9: Geometry and grid of Rotor 37

A multi-block structured grid was generated for the above mentioned domain. A blade tip- clearance of 0.358 mm was incorporated between the blade tip and the shroud surface. The inflow and the outflow boundaries were taken at about one chord distance from the leading edge and trailing edge respectively. The boundary conditions are shown in Fig. 9. The blade surfaces have a rotational velocity and the zone between the blades is modeled as a rotating zone, with a velocity corresponding to the design rpm.

Boundary Conditions and Numerical Details

The design conditions, the numerical details of the simulations, the total pressure based inflow boundary conditions and the initial conditions are given in Tables 2, 3, 4, 5.

| | |
|--------------------------|------------|
| Design Rotational Speed | 17188 rpm |
| Number of blades | 36 |
| Reference temperature | 288.15 K |
| Reference pressure | 101325 Pa |
| Mass Flow Rate (Choking) | 20.93 kg/s |

Table 2: NASA Rotor 37 design condition specifications

| | |
|----------------------|------------------------|
| Solver scheme | AUSM |
| Scheme order | 2nd Order MUSCL-MINMOD |
| Gradient calculation | Least Squares |
| Time marching | Local |
| Formulation | Explicit |
| Residue monitoring | L2 norm |
| CFL | 0.2 |

Table 3: Numerical scheme details

| | |
|--------------------------|-----------|
| Inflow total pressure | 101325 Pa |
| Inflow total temperature | 288.15 K |
| Inflow Mach number | 0.484 |

Table 4: Total pressure based inflow boundary condition

In the current simulation study, a rotationally periodic boundary is used, as they are boundaries that form an included angle about the centerline of a rotationally symmetric geometry. Periodic boundaries extend from the inlet plane to the leading edge of the blade and from trailing edge of the blade to the exit plane.

A radial equilibrium type boundary condition has been used to model the outflow boundary. Applying the radial equilibrium outflow causes the lowest pressure at the outflow to be at the hub and increasing towards the shroud.

In the present case, the blade surfaces have a rotational velocity and the zone between the blades is modeled as a rotating zone, with a velocity corresponding to the design rpm. This is called the frozen rotor method and in this method, a frame transformation is done in the passage between the blades to include the rotating effect. This will give result in a steady flow simulation with no moving meshes. But with the frozen rotor method, it is still possible to accurately obtain the rotating wakes, secondary flows, pressure increase

| | |
|----------------------------|----------|
| Initial static pressure | 70000 Pa |
| Initial velocity X | 150 m/s |
| Initial velocity Y | 0 m/s |
| Initial velocity Z | 0 m/s |
| Initial static temperature | 274.95 K |

Table 5: Initial conditions in the domain

and other tip related effects. This model can be extended to a rotor-stator simulation as well. Spalart-Allmaras (S-A) turbulence model has been used to model turbulent flow.

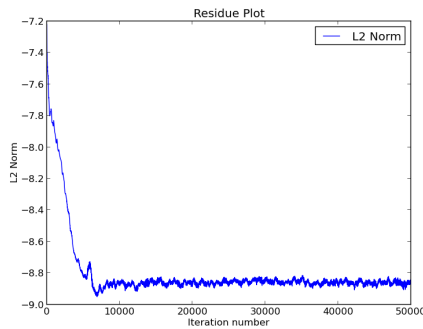


Fig. 10: Mass residue plot for Rotor 37 simulation

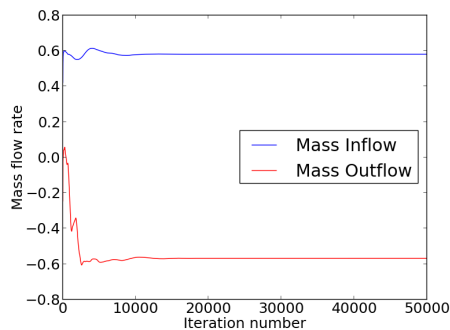


Fig. 11: Inflow and outflow mass flow rates through a Rotor 37 single passage

The mass residue plot is shown in Fig. 10, where we can observe a 2.5 order decrement of mass residue, as per L2 norm. The stability of inlet and outlet mass flow rates through the single passage grid is also considered as a convergence criterion and

it is as shown in Fig. 11. The mass balance, i.e., the sum of inlet mass flow rate and the outlet mass flow rate should approach to zero as the simulation gets converged. As observed in Fig. 11, the mass balance error is quite small.

Results and Discussions

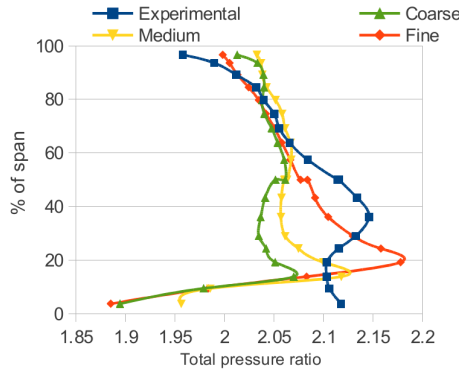


Fig. 12: Radial distribution of total pressure ratio.

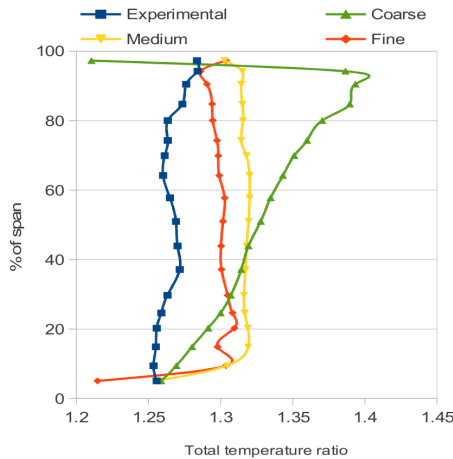


Fig. 13: Radial distribution of total temperature ratio.

The CFD simulation studies have been conducted for three different grid sizes viz coarse ($118 \times 57 \times 41$; total no cells = 203360), medium ($128 \times 61 \times 49$; total no cells = 318432)

and fine ($137 \times 64 \times 61$; total no cells = 453120). The results of CFD simulation have been compared with experimental results. The comparison of the same for radial distribution of total pressure ratio and total temperature ratio have been plotted in Figures 12 -13. The simulated results obtained by fine grid show a good match with the experimental results.

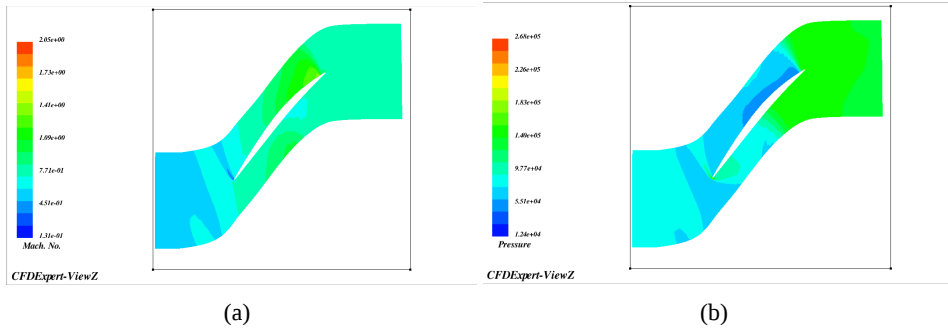


Fig. 14: (a) Mach number contour at 50% span of rotor-37 and (b) pressure contour at 50% span of rotor-37

Figure 14 show the mach number and pressure contours at 50% span of the rotor 37. The plot shows generation of shock near the trailing edge. At the outlet region pressure increases due to the conversion of kinetic energy of the rotor.

HPC Simulation

With the help of high performance computing (HPC) large CFD problem can be solved. In the current study, a large mesh comprising of many stator blades arranged in a circular row is considered. There are 120 blades in the stator row with each blade spanning a 3° arc. Using this geometry a structured mesh comprising of 11642880 cells is created. There are 1440 blocks in the mesh. This huge mesh can not be solved in a single computer owing to its large computational requirement.

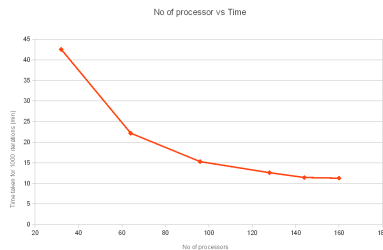


Fig. 15: Scale-up study for stator blade row

Using MPI this kind of large mesh can easily be solved in a HPC system. In this current study, the stator blade row geometry is solved using parallel version of CFDExpert™ on Param YUVA-II at C-DAC. Param YUVA-II is a HPC system with 3584 Sandy-Bridge CPUs (HOST) and 26880 Xeon-Phi co-processor cores (MIC). For the current study only the HOST cpus had been used. A scale-up study was performed for this large grid. Figure 15 shows the time taken to complete 1000 iteration of the solver with the number of cores used. As expected, with more number of computing cores, time required to solve the problem was reduced. In this study, the best performance was observed for 160 cores. However the performance saturates quickly beyond that point as the figure suggests. There may not be any significant gain in performance if the number of cores were increased beyond 160.

Conclusions

CFD simulations studies have been conducted to capture the complex physics of compressible flows. Several validations studies have been conducted, e.g., i) CD Nozzle, ii) Sajben Duct, and iii) NASA Rotor-37. The CFD simulation results were compared against the available literature data. The study covered transonic and supersonic flows in the domain and capturing of shocks, which affect the flows considerably in turbomachinery. In most of the cases, the results obtained by CFD simulations matched closely with published literature data. Further, as the CFD computation size increases HPC can be used to reduce computation time.

REFERENCES

- [1] John D. Anderson, Jr., "Fundamental of aerodynamics", McGraw Hill publications.
- [2] Vilas R. Kalamkar. "Flow Simulation in Turbomachinery using CFD". PhD thesis.
- [3] Langley Research Center Turbulence Modeling Resource, "The Spalart-Allmaras Turbulence Model", <http://turbmodels.larc.nasa.gov/spalart.html>
- [4] NPARC Alliance CFD Verification and Validation Archive, <http://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/cdv/cdv.html>
- [5] K.C. Ng, M.Z. Yusoff, T.F. Yusaf. Simulations of Two-dimensional High Speed Turbulent Compressible Flow in a Diffuser and a Nozzle Blade Cascade.
- [6] NPARC Alliance CFD Verification and Validation Archive, <http://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/transdif/transdif.html>, M. Sajben, J. C. Kroutil, and C. P. Chen, "Unsteady Transonic Flow in a Two-Dimensional Diffuser," AGARD Conference Proceedings on Unsteady Aerodynamics, No. 227, AGARD, Neuilly-Sur-Seine, France, 1977.

- [7] Samy M. El-Behery, Mofreh H. Hamed. A comparative study of turbulence models performance for separating flow in a planar asymmetric diffuser.
- [8] Chunill Hah, "Large Eddy Simulation of Transonic Flow Field in NASA Rotor 37", Paper published in Glenn Research Center, Cleveland, Ohio.
- [9] Saeid Niazi. Numerical simulation of rotating stall and surge alleviation in axial compressors
- [10] Ali A. Ameri, "NASA Rotor 37 CFD Code Validation Glenn-HT code", a paper published in The Ohio State University, Columbus, Ohio.
- [11] Suad Jakirlic, Bernhard Eisfeld, Roland Jester-zürker, Norbert Kroll, "Near-wall, Reynolds-stress model calculations of transonic flow configurations relevant to aircraft aerodynamics".

The triangle of knowledge applied in a remote region

Dionysios Tsichritzis¹, Dionissios Hristopoulos¹

¹*Technical University of Crete, Hania, Greece;*

dennis.tsichritzis@gmail.com

dionisi@mred.tuc.gr

Abstract

The Triangle of Knowledge signifies Education, Research and Innovation working together for economic advancement. The best known example is the Region of Silicon Valley where this synergy produced phenomenal results. In this paper we analyze all the difficulties for implementing such an environment, especially in a remote region. We claim that it is impossible to duplicate the model of Silicon Valley and it is important to seek a model adapted to the Region, with all its strengths and weaknesses. Finally, we give an example of Technology which can be exported and exploited directly from one remote Region to another.

Keywords: education, research, innovation, economic development, investment, science, new trends, regional needs, excellence, regional economy, expertise, mineral resources, spatial data, random fields, geosciences, geostatistics.

Why is Silicon Valley is hard to imitate?

There is no question that Silicon Valley is the best example where the Triangle of Knowledge worked wonders. By The Triangle of Knowledge it is meant the connection between Education, Research and Innovation. In Silicon Valley you find Stanford, one of the best Research Universities in the world. You find several company Research Centers with the best known example being Xerox PARC. Finally, it was in Silicon Valley that many great companies had started, from HP all the way to the recent examples of Google and Facebook. For decades in every corner of the world there was political will plus many initiatives to imitate Silicon Valley. In most cases the results were not encouraging. Surely, top level education was achieved and great Scientific Research was performed. What failed was the connection to economic development. We should add that the difficulties were known from the beginning. However, the problems arose gradually, and in the end there was no return on investment.

The notion of return on investment should be the primary motive. The knowledge triangle is supposed to generate wealth, not to destroy it. Wealth is only created when the economic activity and attracted investments far exceed the cost of running the educational and research effort part of the knowledge triangle. This is the major test where most

imitations of Silicon Valley fail. In addition, the failure is visible only after many years of effort and considerable costs.

The first steps

The knowledge triangle has three parts: Education, Research and Innovation. We will deal with each part separately.

The first step is to create a Research oriented University. This can be achieved by turning an existing University to a major Research oriented University. Universities have an education mandate. They can, however, provide a good education without major resources. The availability of top level lectures and e-learning packages on internet helps Universities to dispense a solid education without top internationally known faculty or advanced labs and expensive campus facilities. Top level Research Universities have a completely different set of requirements. Namely they need:

- Internationally acclaimed scientists as faculty. That means active recruiting over many years.
- An advanced program of studies continuously adapted to new trends and developments.
- A long effort of public relations to achieve brand name
- An attractive environment for students
- An impressive campus including labs and other facilities

To turn an existing University into a Research University you need five to ten years of continuous effort at considerable cost. The restructuring is almost as costly as building a University from scratch. As a matter of fact it is harder than starting something new, because you need to deal with legacy problems, existing personnel and old unsuited facilities.

An alternative is to build a Research Center alongside the University. The Research Center can focus on the scientific domains that the University has strengths and develop closer to new trends and regional needs. In addition, the Research Center can operate with completely different rules regarding promotion, tenure and salary structures. The most important issue in building a Research Center is to keep it young. The average age of personnel should be kept constant. That means that there should be an exit strategy for personnel right from the beginning.; if not, the Research Center will age gratefully and eventually will have no growth potential and no significant impact.

Let's assume that we have the two necessary but not sufficient parts of the Knowledge Triangle, Education and Research. How do we achieve Innovation? In most cases this is achieved by building a Technopark. The idea is that results of the Research effort can be transferred to small companies in the Technopark. The researchers themselves, faculty,

or staff from the University engage and create spin off companies in the Technopark. The Technopark provides space, facilities and a supportive environment for the creation of companies. The transfer from Research to products or services is effective, at least up to the prototype phase. For further development the companies need markets and financing, without it they are destined to die. Some seed capital may be organized at the beginning, but any fund for seed financing is rapidly depleted. There is a need for attraction of venture capital. Venture capital can only come if there is an exit strategy. That's where the problems arise. No government can organize exit strategy. You need large technological companies for trade sales. The alternative as a specialized Innovation stock market is extremely difficult to set up.

In short, in many regions they follow the steps

- University
- Research Center
- Technopark as incubator
- Fund for seed capital of small companies

Finally, if they cannot organize venture capital and offer exit strategies, the effort eventually stalls. That is why it is hard to imitate Silicon Valley.

SWOT: Strengths Weaknesses Opportunities Threats

Right from the beginning we should acknowledge that the exact model of Silicon Valley is impossible. It is rare to have a University with the brand name and Research quality of Stanford and it is very difficult to build it in a remote region. Even if it is achieved, at great expense, it is rare to find the right combination of scientists and entrepreneurs to staff it. One of the reasons is that such talent concentrates exactly in places like Silicon Valley. Even if we attract such people, the effort is far away from the developed markets, so it is hard to place products and services. Finally, venture capitalists place bets only after they already have made money on other bets, so it is problematic to start the effort. The situation is not hopeless but we need another model.

To arrive to the right model we need to start with an analysis of Strengths, Weaknesses, Opportunities and Threats.

All Universities have pockets of excellence. We need to identify them and focus on them. This is contrary to the very model of a University. That is supposed to cover evenly all areas and all professors have similar salaries and working conditions. To create a two speed University is unacceptable, so we have to create a parallel structure of Research Institutes, only on specific areas. The focus areas have to be chosen carefully, either based on the directions of research of the star researchers or on niches where the regional economy and geography offer special advantages. The right combination of research

directions may differ significantly from region to region based on the local conditions. For instance, natural resources and cold climate are the local conditions in Yakutia, whereas sun and tourism are the local conditions in Crete. In addition, the Research Institutes should be organized around problems and not around scientific areas. This choice makes it easier to support economic activity. At the same time, it is contrary to the researcher's preference to be around other scientists who focus in the same or similar research areas.

In order to be rational, we also need to identify the weaknesses. Again, they may be completely different from region to region. For instance, to set up any manufacturing facilities you need excellent transport and logistics. This seems impossible in Yakutia. On the other hand, anything requiring major capital investment is out of the question in Crete. The banking system is weak and the interest rates high. While everybody can place products and services in on the Internet (it is a flat world), it is not true that everybody has the same chances of success. To begin with, it is hard to understand the prevailing world culture of internet users from a remote area.

From the analysis of strengths and weaknesses a series of opportunities become evident. For instance, cold is the main feature of Yakutia. There are Kryogenic data bases where tissue is preserved for further study. Such a world tissue data base can best be organized in a very cold climate. On the other hand, Crete is full of archeological finds. Attraction parks and historical tourism can be developed. It is up to the researchers and the young entrepreneurs to figure out what combination of technology and scientific area can best support such economic activities.

Finally, we need to proceed to an identification of threats. There are earthquakes in Crete, whereas there is the threat of climate change in Yakutia. There is a possibility of isolation in Yakutia due to extreme weather, whereas there is instability in the region and local strikes in Crete. Any political or economic instability greatly affects business strategy and inflow of investment. In addition, there are products that cannot be stored and services that cannot recuperate after a disruption.

Remote to Remote Transfer

Even if we come up with a careful plan for economic development based on Innovation, there are still many holes. On one hand there are scientific strengths and Research results that are not locally needed, plus the market is too narrow to warrant the creation of a company. On the other hand there are needs that cannot be covered by locally available expertise. For such cases we need to match problems with solutions on a global scale.

We will call such effort remote to remote transfer, without going through a company or any organized economic activity. The scientists themselves, they have to go global and seek markets for their ideas. In the past they congregated in conferences where they met with other similarly minded scientists. Now they will have to expand their horizons to visit regions that may have problems matching the expertise that they are offering.

In the sequel we present such an attempt. Crete and Greece is are too small for Geo spatial analysis. Yakutia is large and needs such tools.

A case study: Spatial Data in the Geosciences

To illustrate our case we chose a scientific field where a group in the Technical University of Crete has considerable expertise. On the other hand such expertise can best be applied in vast geographic areas, with considerable mineral resources like Yakutia.

The analysis of spatial and spatiotemporal data is becoming a field of significant research interest due to the increasing availability of spatially distributed data collected at one or several time instants. The information that such data contain regarding spatial trends, spatial variability, and temporal evolution are significant for estimating the impact of climate change, the management of groundwater resources, the exploitation of oil and mineral reserves, and for environmental monitoring. The expected socioeconomic impact from the analysis of large spatiotemporal geo scientific data is highlighted by projects such as the European The EarthServer Initiative and the North American Earth Cube.

Ground measurements are typically distributed on irregular (inhomogeneous) grids in contrast with the uniform step sampling familiar from the analysis of time series. Hence, there is a need for accurate and flexible models of spatial and spatiotemporal dependence, which allow deriving predictive maps with associated uncertainty estimates in the space-time continuum. Examples include the generation of maps of groundwater level over an entire basin from pumping well data (Varouchakis & Hristopoulos, 2013), monitoring of radioactivity levels over large geographical areas (Pebesma et al., 2011), and estimation of drought indices based on precipitation data from meteorological stations and possibly from climate change scenarios (Vrochidou et al., 2013). Methodological problems of continuing research interest include the mathematical properties and the statistical inference of the spatial model parameters, efficient methods for the interpolation and simulation of spatial data, as well as approaches for bridging different spatial and temporal scales.

The Mathematical Framework: Random Fields and Geostatistics

During the last twenty years there is an increased interest in spatial random field models and their applications in various scientific disciplines, which is in part motivated by the need for better statistical models for the analysis of spatiotemporal data. Spatial random fields (SRF's) find applications in subsurface hydrology, petroleum engineering, environmental monitoring, mining exploration and reserves estimation, in the estimation of energy potential for renewable energy resources, as well as in epidemiological studies about the spread of disease.

Geo statistics is a branch of spatial statistics that provides methods for modeling the correlations in spatiotemporal data and for extracting useful information —by means of

interpolation, simulation, and uncertainty estimation— from the data. The development of geo statistics was founded on the seminal distributions of Kolmogorov (1941) and Gandin (1963). Krige (1951) and Matheron (1963) laid the basis for the geo statistical approach and its application to mining data. In the following decades, geo statistical methods were applied to many problems in the earth sciences (Christakos, 1991; Cressie, 1993). From the methodological viewpoint, the main goals of the geo statistical approach involve determining a suitable model of spatial or spatiotemporal dependence and exploiting it for the spatial estimation (prediction) or simulation of the processes of interest.

Geo statistical analysis views spatiotemporal processes as consisting of two components: a deterministic trend function that encompasses large-scale features of the process, and a stochastic component that involves both correlated fluctuations and uncorrelated noise. The *semivariogram function* (also known as structure function)

$$\gamma_x(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \text{E} \left[\{X(\mathbf{s} + \mathbf{r}) - X(\mathbf{s})\}^2 \right] \quad (1)$$

In the above, $X(\mathbf{s})$ is the *spatial random field*, \mathbf{s} is the spatial location vector, \mathbf{r} is the spatial lag, and E is the expectation operator, plays a central in the analysis of the fluctuations. Semivariogram inference is typically performed using the methods of moments and various generalizations (e.g., the robust estimator of Cressie and Hawkins) or maximum likelihood. In the method of moments, the estimation of the *empirical semivariogram* from scattered data involves several heuristic assumptions that lead to considerable uncertainty. The empirical function is fitted to a theoretical model which is used in the interpolation and simulation procedures. The fitting can be performed by various methods potentially leading to different results depending on the approach used (e.g., least squares versus weighted least squares).. On the other hand, maximum likelihood estimation is computationally inefficient for large data sets since its numerical complexity is $O(N^3)$, where N is the number of measurements.

Spartan Spatial Random Fields (SSRFs)

A different approach for modeling spatial dependence is being developed at the Technical University Crete (Hristopoulos, 2003; Hristopoulos and Elongé, 2007, 2009; Varouchakis and Hristopoulos, 2013). This approach is based on the so-called Spartan Spatial Random Fields (SSRFs), and it combines elements from statistical field theory, spatial statistics, and machine learning. The term “*Spartan*” emphasizes that the correlation properties are determined from a small set of parameters that need to be inferred from the data. In contrast, the classical approach requires the estimation and fitting of the empirical semivariogram at several lags. The SSRFs belong in the family of Gibbs random fields. In general, a Gibbs random field $X(\mathbf{s})$ has a joint probability density function (pdf) of the

form

$$f[X(s)] = \frac{e^{-H[X(s)]}}{Z}. \quad (2)$$

In equation (1) the constant Z is a normalization factor obtained by performing the functional integral of $\exp[-H\{X(\mathbf{s})\}]$ over all the states of the random field, and $H[X(\mathbf{s})]$ represents the *energy cost or configuration cost* of the state $X(\mathbf{s})$. According to equation (1), “high-energy” states are less likely than “low-energy” states. The functional $H[X(\mathbf{s})]$ imposes spatial correlations in the state $X(\mathbf{s})$. For geostatistical problems, $H[X(\mathbf{s})]$ does not represent an actual energy; instead, it reflects the likelihood of occurrence of field configurations based on general, intuitively motivated constraints. For example, one possible choice is the following

$$H_{\text{fgc}}[X(s)] = \frac{1}{2\eta_0\xi^d} \int_D ds \left\{ [X(s)]^2 + \eta_1\xi^2 [\nabla X(s)]^2 + \xi^4 [\nabla^2 X(s)]^2 \right\}. \quad (3)$$

In the above, η_0 represents an overall scale factor, η_1 is the rigidity coefficient, and ξ is the characteristic length. Equation (3) represents the energy cost of the fluctuation-gradient-curvature SSRF and involves only local interactions that couple neighboring field values in terms of derivative terms. The classical SRFs can be expressed in the form of equation (2), by means of $H[X(\mathbf{s})] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N X_i C_{\{i,j\}}^{-1} X_j$, where $C_{\{i,j\}}^{-1}$ is the inverse of the spatial covariance matrix between locations \mathbf{s}_i and \mathbf{s}_j . However, the coupling now involves over all pairs of sample points through the inverse covariance matrix which is in general delocalized.

Advantages of SSRFs for Spatiotemporal Data Analysis

SSRFs with energy cost determined by (3) provide a flexible parametric family that encompasses various types of spatial behavior (Hristopulos, 2003; Hristopulos and Elogne, 2007). These covariance functions can be easily extended to include anisotropic correlations through simple transformations (e.g., Chorti and Hristopulos, 2008). In addition, the dependence of the correlation structure on three parameters instead of two implies that length scales of the random field have richer dependence than mere proportionality with ξ (Hristopulos and Zukovic, 2011). The above imply richer covariance structures than those realized by the classical covariance models. Such functions would also be useful as positive-definite kernel functions for machine learning applications. Other advantages of SSRFs stem from the local properties of the interactions which couple only neighboring values through the derivative operators. The practical implications are that procedures such as parameter inference, spatiotemporal interpolation, and conditional simulation can be performed by means of methods that scale in the worst case as $O(N^2)$ and in the best case as $O(N)$ with respect to the size of the dataset. This makes SSRFs ideal for the processing of large spatiotemporal data

sets, especially with Bayesian methods that require repetitive estimation of the model parameters and simulation of the field at the data locations.

There are several research questions that remain open and are worth pursuing in the SSRF framework. One of these directions involves the connection between the continuum formalism and the case of scattered data. Another one is the derivation of additional explicit forms for spatiotemporal covariance functions. Finally, the regime of validity of the asymptotic conditions that lead to interpolation and simulation procedures which scale as $O(N)$ deserves further investigation.

REFERENCES

- [1] Chorti, A., Hristopulos D.T., 2008. Non-parametric identification of anisotropic (Elliptic) correlations in spatially distributed data sets. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 56, 4738–51.
- [2] Christakos, G., 1991. *Random field models in earth sciences*. San Diego: Academic press.
- [3] Cressie, N., 1993. *Statistics for spatial data* (revised, ed.). New York: Wiley.
- [4] Elogne, S.N., Hristopulos, D., and Varouchakis, E., 2008. An application of Spartan spatial random fields in environmental mapping: focus on automatic mapping capabilities. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 22(5), 633–646.
- [5] Gandin, L .S., 1963. *Objektivnyi Analiz Meteorologicheskikh Polei. Gidrometeoizdat* , Leningrad .
- [6] Hristopulos, DT., 2003. Spartan Gibbs random field models for geostatistical applications. *SIAM Journal on Scientific Computation*, 24, 2125–62
- [7] Hristopulos, D.T. and Elogne, S.N., 2007. Analytic properties and covariance functions for a new class of generalized Gibbs random fields. *IEEE Transactions on Information Theory*, 53(12), 4667–4679.
- [8] Hristopulos, D.T. and Elogne, S.N., 2009. Computationally efficient spatial interpolators based on Spartan spatial random fields. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 57(9), 3475–3487.
- [9] Hristopulos, D.T. and Ёukovi , M., 2011. Relationships between correlation lengths and integral scales for covariance models with more than two parameters. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 25(1), 11-19.
- [10] Kolmogorov, A. N. 1941. Interpolirovanie i ekstrapolirovanie statsionarnykh sluchainykh posledovatel' nostei (Interpolated and extrapolated stationary random sequences). *Isvestia AN SSSR, Seriya Matematicheskaya*, 5(1).

- [11] Krige, D. G., 1951. A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand. *Journal of the Chemical, Metallurgical and Mining Society of South Africa*. 119-139.
- [12] Matheron, G., 1963. Principles of geostatistics. *Economic Geology*. 1246–1266.
- [13] Pebesma, E., Cornford, D., Dubois, G., Heuvelink, G.B.M., Hristopulos, D., Pilz, J., Stöhlker, U., Morin, G., Skøien, J.O., 2011. INTAMAP: The design and implementation of an interoperable automated interpolation web service. *Computers and Geosciences*, 37(1), 343-352.
- [14] Varouchakis, E. A. and Hristopulos, D. T., 2013. Improvement of groundwater level prediction in sparsely gauged basins using physical laws and local geographic features as auxiliary variables. *Advances in Water Resources*, 52, 34–49.

Medical image segmentation using MRF-based optimization

Sang Hyun Park¹, Soochahn Lee², Il Dong Yun³

¹*Electrical Computer Engineering, ASRI, INMC, Seoul National University, Republic of Korea;*

tkdgus13135@snu.ac.kr

²*Samsung Electronics, Maetan-3-Dong, Gyunggi-Do, Republic of Korea;*

sc.lee@samsung.com

³*Digital Information Engineering, Hankuk University of Foreign Studies, Republic of Korea;*

yun@hufs.ac.kr

Abstract

In this paper, we review and compare three segmentation methods for segmentation of target organs in medical images, each of which are based on the optimization of Markov random fields (MRF) and utilize a database of similar images and their ground truth segmentations to train relevant information. All three methods follow conventional MRF definitions with unary pixel(voxel)-wise potentials established from statistical prior knowledge of the training set and binary pixel(voxel)-pairwise potentials which reward smooth boundaries and high image gradients. The main difference between the three methods is the unary potential term defined from the training data which, specifically, are defined by 1) construction of a probabilistic shape model from aggregation of aligned manual labels, 2) per-patch label fusion by local weighted averaging of manual labels with weights proportionate to patch appearance similarity, and 3) a structured patch model which adaptively integrates local shape and appearance priors and global structure. Experimental evaluation for each method is performed on the SKI knee MR dataset where performance is measured by segmentation accuracy and computational time.

Keywords: medical image segmentation, Markov random field, Probabilistic model, Label fusion, Structured patch model.

Acknowledgements: this research was supported by Basic Science Research Program through the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Ministry of Education, Science and Technology (2010-0012006).

Introduction

Segmentation of the target organ is a major issue in medical imaging. To obtain this segmentation, prior knowledge such as intensity or shape of the target object is invariantly required. The interactive framework is a practical and common framework to obtain this prior information directly from the user. Here, the user draws scribbles on foreground and background regions or rough contours near an object boundary and segmentation is

subsequently conducted by using the intensity or contour models constructed from the user input. Since this interactive framework requires the time and effort of the user, recent works incorporate high-level prior knowledge learned from training data such as shape and structure into the framework to avoid the necessity of user input and construct a fully automatic method.

Over the years, many different methodologies to determine segmentation labels have been developed, including level set, active shape model, and Markov random field (MRF) optimization. Among these methods, MRF optimization methods are especially well suited to integrate high-level priors with low level statistics since they provide a unified framework that can be easily extended by adding additional terms.

Due to this nature, many specific methods have been proposed. Lijn *et al.* [1] and Lotjonen *et al.* [2] have proposed methods incorporating a global shape prior into the unary potential term of the MRF. In both methods, manual labels of the training data are aligned to the target volume and aggregated to construct a probabilistic shape model. The shape prior acts to constrain segmentation so that unlikely object boundaries do not occur. Both these methods require non-rigid registration for alignment resulting in relatively high complexity. To reduce the relative importance of registration, Coupe *et al.* [3] proposed the patch-based label fusion method. Here, the manual labels of training data are roughly aligned to the target volume and aggregated by weighted averaging. The weights are determined by the appearance similarity between local regions on every voxel. This method performs better than the global label fusion method for many applications. However, variations of highly deformable objects may not be detected by the locally fused labels and the voxel-level processing requires heavy computation. Recently, Park *et al.* proposed a structured patch model [6] which contains sets of corresponding voxel patches representing the same local regions across specific instances in the training set. Properties of the corresponding local patches and spatial relationships between sets of local patches are learned in the model. In the test step, the learned structured patches are localized in the test volume and the voxel potentials are adaptively determined based on local image properties.

In the remainder of this paper, we describe the aforementioned three representative MRF-based segmentation methods in further detail and provide the comparison of their performances for bone and cartilage segmentation in knee MR images. Specifically, a review of the basic formulation of the MRF, along with the details of each method are given in Sec. . Experiment evaluation is described in Sec. .

Segmentation on Markov Random Field

The basic MRF framework for multi-labeling problem is formulated as:

$$E(L) = \sum_{v_i \in V} \phi(l(v_i)) + \lambda \sum_{v_i, v_{i'} \in \Gamma} \delta(l(v_i), l(v_{i'})) \cdot \exp \frac{|I(v_i) - I(v_{i'})|}{2\beta}, \quad (1)$$

where $l(v_i)$ is a random variable representing the label of voxel v_i in voxel set V and L is the label variable set of V . $\phi(l(v_i))$ represents the likelihood term which is defined as the negative log of $P(l(v_i))$, while the exponential function represents the smoothness term between neighboring nodes $(v_i, v_{i'})$ in neighbor set Γ_j . If $l(v_i) = l(v_{i'})$, $\delta(l(v_i), l(v_{i'}))$ is set as 0, otherwise, set as 1. $I(v_i)$ is the intensity of voxel v_i and β is the average square-distance of intensities between adjacent voxels in V . (1) is optimized by the α -expansion method [4] and L is obtained.

Segmentation with global shape priors

Deform fields between two volumes can be obtained by image-based non-rigid registration method. All manual labels in training set are aligned to a target volume V by using the deform fields. Then, probability maps regarding each label are constructed by averaging the aligned labels with the same weight. The likelihood term of (1) is defined as the probability maps in this method. For experiments in this paper, we used the Drop registration [5], one of the MRF based registration methods, to obtain the deform fields.

Segmentation with patch-based Label fusion likelihood

In this method, a probability of each label for each voxel is computed by using the patch-based label fusion method [3]. Similar to the global label fusion method in Sec. , the aligned manual labels are obtained in the initial step by using the Drop registration. Details of next steps are listed in following subsections.

Region of interest (ROI) region. ROI region is defined around a target subject to reduce needless computations in the following steps. To ensure that the target subject is completely included in the ROI, we enlarge the union of all aligned manual labels of training data and set this as the ROI.

Subjects and patch selection. First, M closest subjects with the target subject are chosen from the training data. Similarities between the target subject and the training subjects are measured as sum of the squared difference in the ROI. Then, similar patches are searched in a limited search volume S_i for each voxel v_i from the M closest subjects. The similarity between patches is computed as sum of squared difference. Based on the patch similarity, weighted voting is conducted on the positions where structural similarity measure [3] is higher than 0.95.

Weighted Voting. The probability of a voxel v_i having a label k is computed as:

$$P(l(v_i) = k) = \frac{\sum_{t=1}^M \sum_{j \in S_i} w(v_i, v_{t,j}) \delta(l(v_{t,j}) = k)}{\sum_{t=1}^N \sum_{j \in S_i} w(v_i, v_{t,j})}, \quad (2)$$

where $\delta(l(v_{t,j}) = k) = 1$ if $l(v_{t,j})$ is k , otherwise, 0. $v_{t,j}$ is the j^{th} voxel of a subject t and $w(v_i, v_{t,j})$ is the weight determined by comparing the patch appearance [3]. That is, $P(l(v_i) = k)$ is computed as the weighted sum of k labels in S_i for the M selected subjects.

Parameter setting. In the training step, the experiments with various parameter sets were conducted to some of training data to find the optimal parameter set. Finally, we chose the parameter set (M , size of search volume, size of patch) as (10, 7, 9) for the SKI knee MR data set.

Segmentation with structured patch model

The structured patch model include corresponding patch sets representing the same local regions across the training sets and spatial relationships between adjacent patch sets. In the training step, shape and appearance cues of the corresponding patches and distances and angles between adjacent patch sets are learned. In the test step, the training patches of the model are transferred to appropriate positions in a target volume V by comparing the appearances and the spatial relationships. Finally, the segmentation is conducted by using the shape and appearance cues of the localized patches.

Patch localization After obtaining the deform field between V and a reference volume and normalizing the intensity distribution of V , the structured patches are localized to V . The patch localization problem is formulated as an energy equation on Markov random field (MRF) framework as:

$$E(\mathbf{v}, \mathbf{P}) = \sum_j \phi(v_j|V, \mathbf{P}_j) + \sum_{j,j'} \psi(v_j, v_{j'}|\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_{j'}), \quad (3)$$

where \mathbf{v} is a set of center voxels of localized patches and \mathbf{P} is a set of localized patches. Since the inference of (3) respect to \mathbf{v} and \mathbf{P} requires \mathbf{P} too many labels (the number of position candidates \times the number of patches for each node), the problem is approximated to find only \mathbf{v} by enforcing the costs regarding \mathbf{P} into the position candidates. Therefore, only the positions inside a search space near the aligned position are set as the possible labels. The search space is determined by the position variations of patch correspondences of training sets.

The unary potential $\phi(v_j|V, \mathbf{P}_j)$ represents how similar the appearance of the patch centered at v_j in V is to the training patches \mathbf{P}_j . For each position candidate inside the search space, we compute the normalized cross correlation (NCC) values between the patch and \mathbf{P}_j . The training patch with the highest NCC is set as $P(v_j)$ among \mathbf{P}_j and the highest NCC value is set as the cost of the position candidate. If the cost is larger than 0, the unary potential is set as the negative log of the cost, otherwise, set as large value. The pairwise potential $\psi(v_j, v_{j'}|\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_{j'})$ enforces the spatial relationships

between center positions v_j and $v_{j'}$ of the neighboring patches. The distance and angles of the two positions in three dimensional space are computed and their values regarding the distance and the angles are acquired from the histograms of distance and angles differences between the patch sets \mathbf{P}_j and $\mathbf{P}_{j'}$. The values from the different histograms are summated to the cost of pair j and j' with the same weights. $\psi(v_j, v_{j'} | \mathbf{P}_j, \mathbf{P}_{j'})$ is set as the negative log of the cost. The α -expansion method [4] is used to optimize (3) and \mathbf{v} and \mathbf{P}^t are obtained.

Probabilistic model based on localized classifier The voxel-wise probabilistic model is constructed by using the localized classifier. Shape and appearance models are adaptively combined according to the learned model of localized patch on each local region. Then, the probability maps of local regions are aggregated to a global probability map. Each voxel can be included in multiple patches on the overlapping regions between adjacent patches. In this case, probabilities regarding the multiple patches are averaged to obtain the global probability.

Experimental Results

SKI data set [7] was released for the bone and cartilage segmentation challenge in MICCAI 2010 (<http://www.ski10.org>). MR images were acquired in the sagittal plane with a pixel spacing of $0.4 \times 0.4 \text{ mm}^2$ and a slice distance of 1 mm with varying image sizes. Since ground truth labels of the test set were not opened, we selected sub samples, ten subjects for training and eight subjects for testing, from the training set for in this experiments. All experiments was done by C++ on a PC with 2.93 GHz Intel Core i7 CPU, NVIDIA Geforce GTX 480, and 16GB of RAM.

We measured the segmentation accuracy as the Dice Similarity Coefficient (DSC). DSC represents the ratio of overlapping volume to the average of the two volumes as $DSC(\mathbf{S}, \mathbf{R}) = \frac{2|\mathbf{S} \cap \mathbf{R}|}{|\mathbf{S}| + |\mathbf{R}|}$, where \mathbf{S} represents the voxels of the segmentation result and \mathbf{R} represents that of the reference segmentation.

Table 1 presents the DSC performances of three methods for segmentation of bones (femur and tibia) and cartilages (femoral cartilage and tibial cartilage). For most cases, the label fusion based method (LF) and the structure patch model based method (SPM) outperformed the method based on global shape prior (GP). Especially, the cartilages were not detected well because the registration performance was limited to align the thin and deformable cartilage shapes. DSC of LF method is slightly better than that of SPM method for femur and tibial cartilage cases, while worse for tibia and femoral cartilage cases.

We also compared computational times of the three methods. GP method and SPM method took around 3 minutes and 2 minutes, respectively, while LP method took over 5 hours for the segmenting four parts in a subject. We noted that the computational time of SPM method was much more efficient compared to that of LF method even though

the accuracies of two methods were similar to each other.

Table 1: Segmentation performances of three MRF-based segmentation methods for SKI knee MR data set [7]. GP denotes the method based on global shape prior, LP denotes the method based on label fusion, and SPM denotes the method based on structured patch model.

| Idx | Femur | | | Tibia | | | Carti(F) | | | Carti(T) | | |
|-----|-------|--------------|-------|-------|-------|--------------|----------|-------|--------------|----------|--------------|-------|
| | GP | LF | SPM | GP | LF | SPM | GP | LF | SPM | GP | LF | SPM |
| 1 | 0.923 | 0.960 | 0.952 | 0.923 | 0.968 | 0.969 | 0.381 | 0.722 | 0.665 | 0.170 | 0.598 | 0.528 |
| 2 | 0.917 | 0.929 | 0.956 | 0.896 | 0.936 | 0.975 | 0.453 | 0.300 | 0.692 | 0.153 | 0.202 | 0.480 |
| 3 | 0.871 | 0.942 | 0.942 | 0.922 | 0.951 | 0.981 | 0.483 | 0.693 | 0.744 | 0.414 | 0.600 | 0.589 |
| 4 | 0.947 | 0.962 | 0.925 | 0.930 | 0.973 | 0.972 | 0.404 | 0.600 | 0.524 | 0.133 | 0.403 | 0.343 |
| 5 | 0.946 | 0.976 | 0.970 | 0.964 | 0.983 | 0.982 | 0.654 | 0.741 | 0.698 | 0.558 | 0.710 | 0.529 |
| 6 | 0.937 | 0.964 | 0.974 | 0.911 | 0.970 | 0.976 | 0.523 | 0.696 | 0.621 | 0.180 | 0.583 | 0.515 |
| 7 | 0.926 | 0.956 | 0.966 | 0.927 | 0.961 | 0.955 | 0.412 | 0.651 | 0.654 | 0.199 | 0.621 | 0.445 |
| 8 | 0.945 | 0.967 | 0.951 | 0.917 | 0.972 | 0.973 | 0.500 | 0.692 | 0.618 | 0.157 | 0.570 | 0.462 |
| avg | 0.927 | 0.957 | 0.954 | 0.924 | 0.964 | 0.973 | 0.476 | 0.637 | 0.652 | 0.245 | 0.536 | 0.486 |

Conclusion

We came up with the performances of bone and cartilage segmentation for three MRF-based segmentation methods based on the global shape prior, the label fusion, and the structured patch model. LF and SPM methods outperformed GP method in terms of the segmentation accuracy, while GP and SPM methods outperformed LF method in terms of the computational time.

REFERENCES

- [1] van der Lijn, F. and den Heijer, T. and Breteler, M. M. and Niessen, W. J. Hippocampus segmentation in MR images using atlas registration, voxel classification, and graph cuts. *NeuroImage*, 2008. V.43. P.708-720.
- [2] Lotjonen, J. M. and Wolz, R. and Koikkalainen, J. R. and Thurfjell, L. and Waldemar, G. and Soininen, H. and Rueckert, D. Fast and robust multi-atlas segmentation of brain magnetic resonance images. *NeuroImage*, 2010. V.49(3). P.2352-2365.
- [3] Pierrick Coupe and Jose V. Manjon and Vladimir Fonov and Jens Pruessner and Montserrat Robles and D. Louis Collins. Patch-based segmentation using expert priors: Application to hippocampus and ventricle segmentation. *NeuroImage*, 2011, V.54(2). P.940-954
- [4] Vladimir Kolmogorov and Ramin Zabih, What energy functions can be minimized via graph cuts?. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2004. V.26(2), P.147-159

- [5] Glocker, B. and Komodakis, N. and Tziritas, G. and Navab, N. and Paragios, N. Dense image registration through MRFs and efficient linear programming. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2008. V.12. P.731-741.
- [6] Park, S. and Yun, I. and Lee, S. Data-driven Segmentation Method based on Structured Patch Model for Medical Images. *IPMI*, 2013.
- [7] Tobias Heimann and Bryan J. Morrison and Martin A. Styner and Marc Niethammer and Simon K. Warfield, Segmentation of Knee Images: A Grand Challenge. In *Proc. MICCAI*, 2010.

Numerical modeling of filtration flows and evaporation fronts in low permeability nonwettable porous medium

Shargatov V.¹, Il'ichev A.², Krivosheev A.¹

¹*National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia;*

shargatov@mail.ru

davegahan32@rambler.ru

²*Steklov Mathematical Institute, Moscow, Russia;*

ilichev@mi.ras.ru

Abstract

The evolution and shapes of water evaporation fronts caused by long-wave instability of vertical flows with a phase transition in extended two-dimensional horizontal porous domains are analyzed numerically. A low-permeability layer is assumed to lie between a high-permeability layer and the space of an underground structure. The stability of flows with respect to localized finite amplitude perturbations is analyzed. The stability of low interface position in the case of localized finite amplitude perturbations of boundary between porous medium and the space of an underground structure is studied numerically. A certain threshold amplitude value exists at which perturbations with larger amplitudes lead to vanishing of stable stationary solution.

Keywords: porous medium, diffusion, humidity, water evaporation front, phase transition, stability, bifurcation, numerical method.

Acknowledgements: this work was supported by the RFBR, project No 13-01-12047.

Introduction

Instability of vertical flows with a phase transition interface in a horizontally infinite two dimensional domains of a porous medium is studied numerically. We consider isothermal flows with a phase transition in unbounded horizontal porous regions. A low-permeability layer is assumed to lie between a high-permeability layer and the space of an underground structure. The water layer is located over an air-vapor layer in a porous medium fig. 1. We will assume there is no zone occupied by a water-steam mixture but there is a clear phase transition boundary which separates a water layer without steam admixture from air-vapor. Evaporation takes place on this interface. The forming vapor diffuses through the air-vapor domain Ω_2 to the free surface $z = L(x)$, which is blown by air. Diffusion of vapor occurs when the partial pressure of water vapor near the evaporation surface is higher than that at contact with the free surface. On the phase interface the pressure has a jump equal to the capillary pressure. We will consider the

case in which the temperature is independent neither of space coordinates nor time and equal to T_0 .

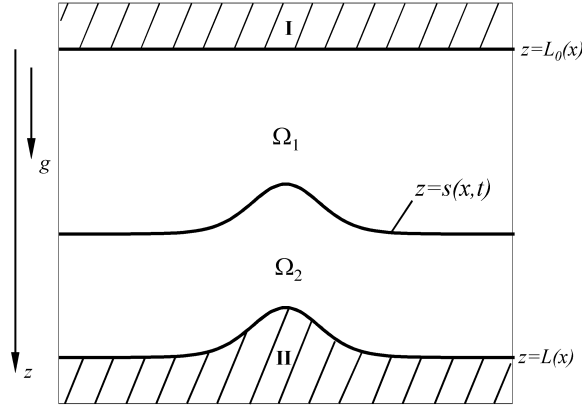


Fig. 1: The problem geometry. I - highly permeable region $\{z < 0, -\infty < x < \infty\}$, II - region of the underground structure with boundary perturbation $\{z > L(x), -\infty < x < \infty\}$, Ω_1 - zone of the low-permeability stratum of a porous medium occupied by water $\{L_0(x) < z < s(x, t), -\infty < x < \infty\}$, Ω_2 - zone of the low-permeability stratum of a porous medium occupied by vapor-air mixture $\{s(x, t) < z < L(x), -\infty < x < \infty\}$.

Governing equations and boundary conditions

We use the system of governing equations and boundary conditions from [1]:

$$0 \leq z \leq s(x, t) : \Delta P = 0; \quad z = 0 : P = P_0; \quad z = s(x, t) : P = P_f \equiv P_a + P_c,$$

$$s(x, t) \leq z \leq L(x) : \frac{\partial \nu}{\partial t} = D \Delta \nu; \quad z = L(x) : \nu = \nu_a; \quad z = s(x, t) : \nu = \nu_*,$$

$$V_n = -\frac{k}{m \mu_w} [\text{grad}(P - \rho_w g z)]_{n1} + D \frac{\rho_a}{\rho_w} (\text{grad} \nu)_{n2}.$$

Here, x and z are the horizontal and vertical space coordinates (fig. 1), ρ is the density, P is pressure, P_c is the capillary pressure, g is the acceleration of free fall, k is the rock permeability in zones Ω_1 and Ω_2 , μ is the viscosity, m is the porosity, ν is humidity, ν_* is the saturation humidity, ν_a is the humidity of air in the underground construction, V_n is the velocity of the phase transition interface, the subscript n denotes the normal to the phase interface, and the n_1 and n_2 correspond to quantities in the liquid and vapor-air zones, respectively. The subscripts denote: w water, v vapor, a air.

Basic flow

In [1] it was shown that the plane phase transition interface is in some equilibrium position $z = H \cdot L_1$ if the boundary between porous medium and the space of an underground structure is plane, ($L(x) = L_1$)

$$H = \left(-\frac{(\beta - \alpha - 1)}{2} + \frac{\sqrt{(\beta - \alpha - 1)^2 - 4 \cdot \alpha}}{2} \right), \tag{1}$$

$$\alpha = \frac{P_c + P_a - P_0}{\rho_w \cdot g L_1}, \quad \beta = \frac{D \rho_a}{k \rho_w} \frac{m \mu_w}{\rho_w g L_1} (\nu_* - \nu_a).$$

It is easy to see that, for a neutral ($P_c = 0$) or wettable ($P_c < 0$) porous medium, when $\alpha < 0$, one root in (1) is positive and the other is negative. Only the positive root, which corresponds to a plus sign preceding the radical in (1), has a physical interpretation. The linear stability of these horizontally homogeneous steady-state flows was investigated in [1]. It was shown that if both roots are positive then two stationary solutions can exist for plane surface of evaporation. One of them is unstable and other may be stable or unstable. It depends on two key parameters α and β . Three bifurcation diagrams corresponding different cases of instability is given in fig. 2. The lower front position can be stable (see line 3 and 4 in fig. 2) or can be unstable for short waves (see line 5 from point D to the turning point). The upper front position can be unstable for long waves (line 3 and line 4 from point B to the turning point) or can be unstable for all perturbations (line 5).

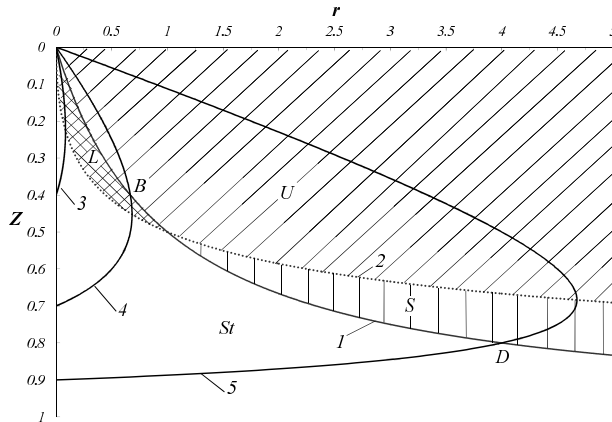


Fig. 2: Bifurcation diagrams H versus $r = \alpha/\beta$ at a fixed β : 3 - $\beta = 0.6$, 4 - $\beta = 0.3$, 5 - $\beta = 0.1$. Curves 1 and 2 correspond to the boundaries of domains of existence of four possible types of instability. 1 - $Z=r/(1+r)$; 2 - $Z = \sqrt{r}/(1 + \sqrt{r})$. St - stable flow, U - unstable flow, S - short-wave instability, L - long-wave instability

The stability of flows with respect to localized finite-amplitude perturbations is analyzed. We limit our study to the situation, when the lower interface position is linearly

stable and the upper interface position is linearly stable for only short wave perturbations (the most unstable normal mode has the zero wave number).

Numerical method

In the problem under study, we need to solve an elliptic equation with a moving boundary, a parabolic equation with a moving boundary, and the equation of motion of the moving boundary, i.e. the phase transition interface. When the parabolic and elliptic equations are solved, a key role is played by the accuracy of the computed pressure and humidity gradients on the moving boundary, since these quantities determine the normal velocity of the phase transition interface. The presence of a moving boundary complicates the computational algorithm, since the computational domain for both equations varies with time. Moreover, even if the normal velocity is given, the computation of the position of a phase transition interface is an algorithmically time-consuming problem, especially in the case of fast growing short-wave perturbations, which can change the connectivity of the computational domain. In the numerical computation, the phase transition interface is represented as a polygonal line consisting of segments (panels). Full description of numerical method is presented in [2], [3].

Stability of stationary phase transition fronts with respect to localized perturbations

Consider the case where the basic flow corresponds to an unstable upper equilibrium (as on upper branch of line 3 in fig. 2). For example, if $\alpha = 0.02$ and $\beta = 0.57$, the equilibrium positions of the phase transition interface have the coordinates $H_s = 0.05$ and $H_l = 0.4$. Then the initial perturbation $s(x, 0) = L_1(H_s + A_e \exp(-(2x/\lambda_e)^2))$ has the amplitude $A_e = 0.005$ and a wavelength $\lambda_e = 0.075871$. This perturbation is directed downward and is between the lower stable and upper unstable equilibrium positions. The chosen basic flow is unstable with respect to infinitesimal harmonic perturbations whose wavelength exceeds $\lambda_m = 0.39$. Since $\lambda_e < \lambda_m$ the amplitude of an infinitesimal harmonic perturbation with such a wavelength decreases monotonically with time.

We now consider how a localized perturbation with the same effective wavelength will evolve. The amplitude varies nonmonotonically in contrast to a harmonic perturbation. The position of the phase transition surface at different instants is shown in fig. 3. Fig. 3 indicates that the initial perturbation decreases in amplitude (lines 1–4). In this case the perturbation effective length increases. Then, the perturbation amplitude reaches its minimum and subsequently varies insignificantly during some period (line 5 in fig. 3); at the same time, the perturbation continues expanding. During the next periods, the perturbation amplitude increases, which is accompanied by a perturbation expansion (lines 6, 7 in fig. 3). Thus, a localized perturbation with an effective dimension corresponding to the wavelength of a damping harmonic perturbation increases.

In spite of an apparent contradiction, such a perturbation evolution character qualitatively completely corresponds to the results presented in [1]. The considered case corresponds to the long-wavelength flow instability. The initial perturbation has the characteristic dimension smaller than λ_m ($\lambda_e < \lambda_m$). A harmonic perturbation with such a wavelength tends to the position of equilibrium in the course of time, which corresponds to an unstable vertical flow. In this case the harmonic perturbation wavelength remains constant. A single perturbation behaves differently. The perturbation amplitude decreases, but its wavelength increases. Beginning from a certain instant, the wavelength becomes larger than λ_m , the flow becomes unstable, and the perturbation amplitude starts increasing. The amplitude stops increasing at the position corresponding to a stable vertical flow. We note that an analysis of the flow stability with respect to infinitely small perturbations (see [1]) is in not only qualitative but also quantitative agreement with the presented calculation results, namely: a decrease in the perturbation amplitude is replaced by an amplitude growth when the perturbation effective width is close to $\lambda_m = 0.39$ (line 4 in fig. 3).

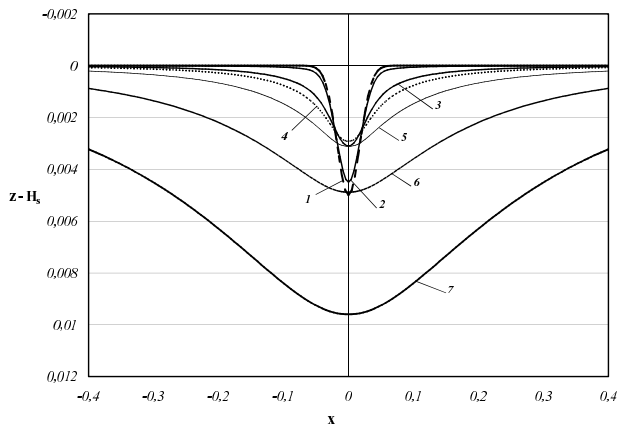


Fig. 3: Position of the disturbed phase transition upper surface at different instants (a perturbation is directed toward the stable phase transition surface). Lines 1, 2, 3, and 4 correspond to a decrease in the initial perturbation; lines 6 and 7, to the perturbation with increasing amplitude and width.

To study the possible nonlinear effects related to the fact that the perturbation amplitude becomes comparable with the distance between the stable and unstable basic flow positions but remains much smaller than 1 (the dimensionless thickness of the considered layer), we select $\alpha = 0.1$ and $\beta = 0.467$. For these α and β values, the positions of equilibrium are at $H_s = 0.3$ and $H_l = 0.3333$, and $H_l - H_s \ll 1$. The amplitude of an any infinitesimal harmonic perturbation of the stable position $H_l = 0.3333$ decreases monotonically with time.

We determine the perturbation parameters at which its "finiteness" qualitatively changes the evolution scenario of the phase transition stable front. For this purpose, we

performed the series of calculations at constant wave length $\lambda_e = 5.05$. The boundary conditions and the perturbation dimension remained unchanged, and the perturbation initial amplitude varied. Fig. 4 show the time variations in the perturbation amplitude of the stable basic flow ($H_l = 0.3333$) for different initial amplitude values. Fig. 4 indicates that a certain threshold amplitude value exists at which perturbations with larger amplitudes increase up to the upper boundary, and smaller amplitude perturbations damp. For example, the perturbation increases at $A_e = 0.055$ (line 3) and damps at $A_e = 0.0525$ (line 4). In this case the threshold perturbation amplitude (0.05375) is substantially larger than the distance between the equilibrium levels ($H_l - H_s = 0.0333$). Thus, the finite perturbation can cause destabilization of the basic flow, which is stable with respect to any infinitely small harmonic perturbation. This can occur when the perturbation amplitude is substantially larger than the distance between the equilibrium levels and the perturbation is largely above the unstable equilibrium level.

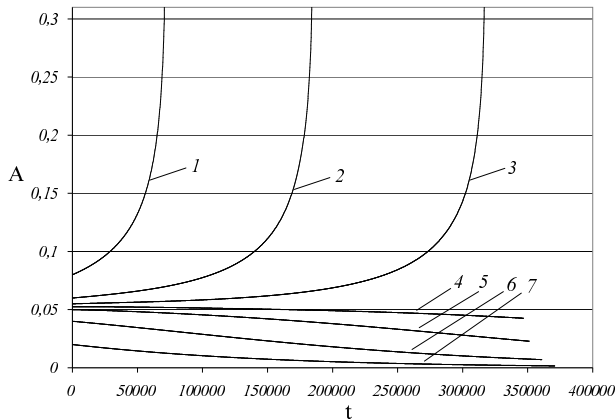


Fig. 4: Time variations in the perturbation amplitude when the perturbation length is $\lambda_e = 5.05$: (1) $A_e = 0.08$, (2) $A_e = 0.06$, (3) $A_e = 0.055$, (4) $A_e = 0.0525$, (5) $A_e = 0.05$, (6) $A_e = 0.04$, and (7) $A_e = 0.02$.

If the initial amplitude is near the threshold value, the perturbation amplitude can first decrease and then starts increasing. During the first evolution stage, the perturbation amplitude of the phase transition lower stable surface decreases simultaneously with increasing width (fig. 5, line 2). The perturbation threshold amplitude increases with decreasing horizontal perturbation dimension. At some instant, this threshold value can become smaller than the decreasing amplitude current value. In this case the amplitude will stop decreasing and start increasing, as a result of which the basic flow finally destabilizes (fig. 5 lines 3, 4).

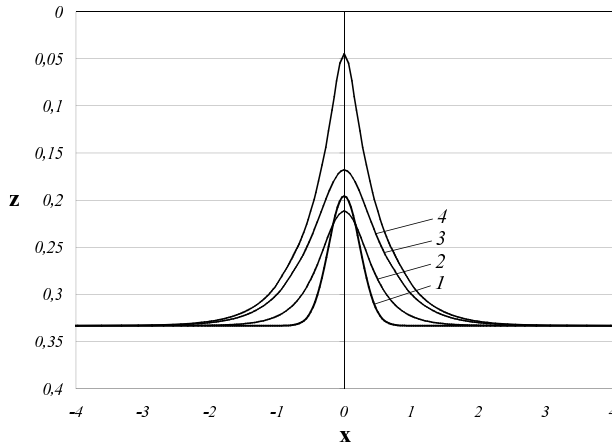


Fig. 5: Evolution of the phase transition surface when the lower stable position of equilibrium is disturbed (the levels are close to each other): (1) $t = 0$, (2) $t = 79775$, (3) $t = 68200$, (4) $t = 255544$. $\lambda_e = 1.01$.

Destabilization of evaporation front by localized finite amplitude perturbation of boundary between the porous media and a space of underground construction

The stability of low interface position in the case of localized finite amplitude perturbations of boundary between porous medium and the space of an underground structure is studied numerically. The perturbation of boundary $L(x) = L_1 + A_b \exp(-(2x/\lambda_b)^2)$ is directed upward as in (fig.1) if $A_b < 0$. The phase transition interface has stable and stationary (but not plane) position if the localized finite amplitude perturbations of the plane boundary between of the low-permeability layer and free-space region is directed downwards. If the localized finite amplitude perturbations of this boundary is directed upwards and the amplitude of these perturbations is greater than some critical value depending on the horizontal size of the perturbation they grow with time as shown on fig. 6. For $A_b = -0.1$ fig. 7 shows the evolution of plane transition surface to new position of equilibrium corresponding perturbed low boundary of porous medium. For $A_b = -0.12$ and the same wavelength the phase transition interface reaches the upper boundary (fig. 6).

Fig. 8 indicates that a certain threshold amplitude value exists at which perturbations with larger amplitudes lead to vanishing of stable stationary solution. The minimal value of threshold amplitude corresponds the zero wave number and are expressed by formula

$$\frac{A_b}{L_1} < -1 + (\sqrt{\alpha} + \sqrt{\beta})^2.$$

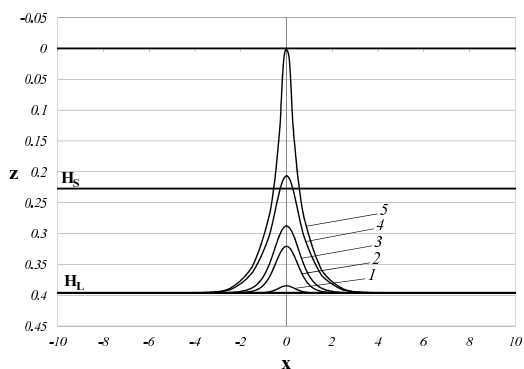


Fig. 6: Evolution of low stable level. $A_b = -0.12$, $\lambda_b = 3$, $1 - t = 135.2$, $2 - t = 38453.5$, $3 - t = 110258$, $4 - t = 529309$, $t = 571248$

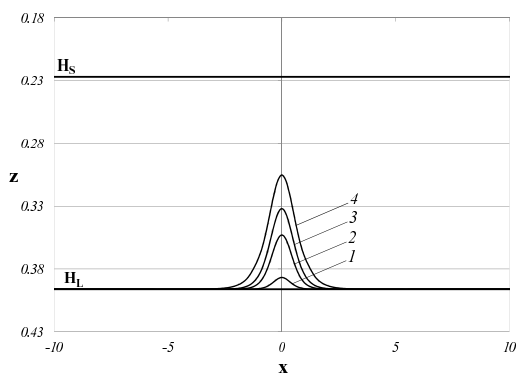


Fig. 7: Evolution of low stable level. $A_b = -0.1$, $\lambda_b = 3$, $1 - t = 138.33$, $2 - t = 20077.4$, $3 - t = 20077.4$, 4 - stationary solution.

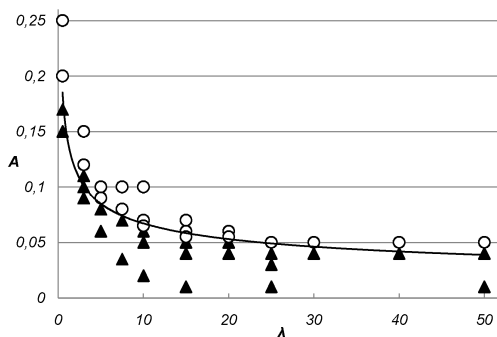


Fig. 8: Critical value of amplitude A versus wave "length" of finite disturbance of low boundary of high permeability layer: ▲ - stationary solution exists, ○ - no stationary solution; ($\alpha = 0.09$, $\beta = 0.0467$)

REFERENCES

- [1] Il'ichev A.T., Tsyarkin G.G. Instabilities of uniform filtration flows with phase transition // JETP. 2008. V. 107. I. 4. P. 699-711.
- [2] Il'ichev A.T., Shargatov V.A. Dynamics of Water Evaporation Fronts // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2013. V. 53. I. 9. P. 1350-1370.
- [3] Shargatov V.A., Krivosheev A.V., Gubin S.A., Lozik N.F. Neustoychivost' stacionarnogo reshenia odnorodnogo fil'tracionnogo techeniya s fazovum pereodom // Vestnik NIYaU MEFhI. 2013. V. 2. I. 3. P. 305-313

Fundamental approaches of definition of parameters turbulent boundary a layer in a supersonic stream

Sidnyaev N.I.

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia;

sidnyaev@bmstu.ru

Abstract

The research results of transition of boundary-layer flow from the laminar to turbulent form in on a streamlined body with fractures forming are presented. The examples of the analytical and numerical solution are presented within the framework of a boundary layer theory.

Keywords: viscous forces, equations, gas, boundary layer, solution, formparameter.

Introduction

For definition of the external factors effect on the characteristics of a boundary layer and accuracy of definition of parameters the special calculation of a flow of the pattern of cylindric-conical body were conducted which represented the blunt semi-angle of disclosure of a lateral area 10° , with a central cylindrical part with 0° and conical stabilizer 14° , relative bluntness of a nose 0.2, in radius of a midship $r = 0.035$ m and length $L = 0.227$ m [1].

The contour of the pattern had points of a fracture, that resulted in appearance of characteristic zones, which into account parameters of were to be taken a boundary layer for the calculation. At a flow by a supersonic flow the field of current about a body was divided into 2 areas: in the first the viscous forces are negligibly small and the second, near border area, in which the viscous forces play an essential role. The flow in the first area is described by equations of ideal gas, and in the second -by equations of a boundary layer. In this connection the basic contribution in gaz-dynamics of the characteristic of such class of bodies can be defined from the solution of ideal gas, and then to find the corrections to them at the expense of effects of viscosity. It is to remark, that for the blunt bodies of such class, these corrections can constitute a significant share part of the resistance [2]. The function fields in a shock layer about bluntness, which are basic data for account of supersonic current along a lateral area of a body, settle up beforehand with the help of numerical account by a method of establishment.

Results of theoretical researches

After a solving the external flow the storage of the arrays is made which include pressure profiles and enthalpies along forming an initial body, and also enthalpy along coordinate lines inside a shock layer. The new variables ξ, η connected with a body were entered:

$$\xi = \int_0^x \mu_w \rho_w u_e r^2 dx; \quad \eta = \frac{\rho_e u_e r}{\sqrt{2\xi}} \int_0^y \frac{\rho}{\rho_e} dy$$

Here u_e - speed on an outer boundary of a boundary layer; ρ, ρ_w, ρ_e - density accordingly current, on a wall and on an outer boundary of a boundary layer; μ_w - dynamic viscosity on an outer boundary of a boundary layer; r - cylindrical coordinate. The account of a turbulent boundary layer is based on usage of an integrated ratio of momentums and integrated characteristics of the four-parametric set of locally - similar structures of speed and enthalpy [3]. For receiving the indicated structures the framework of the semiempirical theory of turbulence was used. The two-layer pattern of a boundary layer was accepted. In internal area including a laminar sublayer and transitory area (buffer layer), the turbulent viscosity is calculated on the basis of the Prandle theory $\epsilon_i = l^2 \left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)$ intermixing [2, 3], and in external area of a boundary layer (in the turbulent environment) the expression for constant across a layer of turbulent viscosity ϵ_0 in the Klauzer-Klebanov form is used [3, 4]. According to this pattern the turbulent kinematics viscosity is the constant, and proportional characteristic size of a boundary layer, i.e. displacement thickness δ^* . Applying to equations of a boundary layer [4], generalized Levi-Liz transformation

$$\frac{d\xi}{dx} = \rho_e u_e \mu_e \varphi \left(\frac{r}{L} \right)^{2j}, \quad \frac{d\eta}{dy} = \rho u_e \frac{1}{\sqrt{2\xi}} \varphi \left(\frac{r}{L} \right)^j,$$

and considering the solution, in which flow function j and dimensionless enthalpy \bar{J} depend only on cross-sectional coordinate, the following transformations of an equation of momentums and energy were received:

$$\begin{aligned} [N f''']' + f f'' + \beta \left(\frac{\rho_e}{\rho} - f'^2 \right) &= 0, \quad (P g')' + f g' + (Q f' f'')' = 0, \\ N &= \frac{\rho \mu}{\rho_e \mu_e} + \gamma_t \frac{\rho^2 \epsilon}{\rho_e \mu_e} = N_L + \gamma_t N_T, \quad P = \frac{N_L}{Pr} + \gamma_t \frac{N_T}{Pr_t}, \\ \gamma_t &= 1 - exp \left[-3 \left(60 + 4, 86 M_e^{1,92} \right)^{-2} Re_t^{0,66} \frac{s-s_t}{s_t^2} u_\delta \int_{S_t}^S \frac{ds}{u_e} \right], \\ Q &= 2\alpha_e^2 \left(\left(1 - \frac{1}{Pr} \right) N_L + \gamma_t \left(1 - \frac{1}{Pr_t} \right) N_T \right), \quad f = \int_0^\eta \frac{u}{u_e} d\eta, \quad \beta = \gamma_1 \xi \frac{d \ln u_e}{d \ln \eta} \end{aligned} \quad (1)$$

If $\nu \rightarrow \infty$ the solution of equations (1) allows to receive the required four-parametric set of locally - similar structures of speed and enthalpy. Here ρ - density, u - speed

in coordinates (ξ, ν) , μ - dynamic viscosity, $j = 0$ flat section(cross-section), $j = 1$ axisymmetrical current, Pr , Pr_t - molecular and turbulent Prandle numbers, α_e - Krokko number, where parameter $\gamma_1 = 2$ (laminar-flow layers), $\gamma_1 = 1.25$ (turbulent layer), ϵ - factor of turbulent viscosity, ν - kinematics viscosity, the strokes mean derivation on coordinates η . On a surface of a body $\eta = 0$ at transition to new by a variable the attitude of full enthalpies in a boundary layer and external flow $g(\xi, \eta) = \frac{J}{J_e}$. The indexes "0", "e", "w" correspond to initial significances, outer boundary of a boundary layer and on a surface of a body, st and Ret coordinate of a point and Reynold's number of a beginning of transition. The changes, received in a broad band, of defining parameters (fig. 1) The structures of speed allow to calculate the required characteristics of a boundary layer:

$$C_f = f(M_e, \beta, Re_\xi, \bar{T}_w), \quad St = f(M_e, \beta, Re_\xi, \bar{T}_w), \quad \Delta^* = f(M_e, \beta, Re_\xi, \bar{T}_w), \\ \Delta^{**} = f(M_e, \beta, Re_\xi, \bar{T}_w), \quad H = \frac{\delta^*}{\delta^{**}} = \frac{\Delta^*}{\Delta^{**}}.$$

Here $\frac{\delta^*}{\delta^{**}}$ and $\frac{\Delta^*}{\Delta^{**}}$ - displacement thickness and losses of a momentum in planes X, Y and ξ, η accordingly. Integration of an equation of momentums together with the received additional ratio allow to receive distribution of all necessary parameters of a boundary layer along a lateral area of the body (fig. 1). For account of currents at $M_\infty = 6$ and if there is an injection locally - similar structures of speed and the enthalpies are by the solution of a set of equations (1) at terminal conditions:

$$f = \frac{1}{\sqrt{2\xi}} \int_0^\xi \left(\frac{L}{r}\right)^j \frac{\rho_w \nu_w}{\rho_e u_e \mu_e} d\xi, \quad f' = 0, \bar{J} = \bar{J}_w, \text{ at } \eta = 0 \quad f' \rightarrow 1, \bar{J} \rightarrow 1 \text{ at } \eta \rightarrow \infty.$$

With the help of accepted flow function transformation on a wall in this case were written as follows:

$$f_w = -\frac{\rho_w \nu_w}{\rho_e u_e} \frac{Re_x}{\sqrt{2Re_\xi}}.$$

Conducted in a broad band of parameters the accounts allowed receiving followind dependences:

$$\frac{C_f}{C_{f0}} = 1 - 0.253B, \quad \frac{St}{St_0} = 1 - 0.253B_1, \quad \frac{\delta^*}{\delta_0^*} = 1 + 0.38B, \quad \frac{\delta^{**}}{\delta_0^{**}} = 1 + 0.36B$$

$$B = \frac{\rho_w \nu_w}{\rho_e u_e} \frac{Re_x}{Re_\xi}, \quad B_1 = \frac{\rho_w \nu_w}{\rho_e u_e} \frac{1}{St_0}.$$

Here index "0" corresponds with parameters on a permeable wall. From results of researches of a flow of permeable rough surfaces [1, 4] it is known, that up to values $k^+ = 10/$, $\left(k^+ = \frac{\nu_* h}{\nu_w}\right)$, where ν_* - dynamic speed, equal $\sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}}$. Here h -height of a roughness permeable surface. For definition of a local friction coefficient in case of sand

roughness $k^+ > 10$ the ratio $\frac{C_f}{C_{f0}} = 1 + 0,9(\lg k^+ - 1)$. Here is the C_{f0} appropriate significance C_f on a smooth wall:

$$C_{f0} = \frac{\rho_w \nu_w}{\rho_e u_e} \frac{2}{B}$$

It is necessary to under line, that the dependence of a wavelength of a disturbance of a boundary layer on number Re is defined by Blazius structure [2]. The least number Re , defined by a neutral curve, represents a theoretical critical number $Re_{cr. min}$ - limit of stability of a laminar boundary layer ad-hoc flows. So, for example, for an incompressible liquid a critical number Re , appropriate to an instability point, $\frac{u_\infty \delta^*}{\nu_\infty} = Re_{cr. min} = 420$. The researches display, that the limit of stability of a boundary-layer profile essentially depends on the form of a contour of a surface (fig. 1, 2). As the curvature of speed structure is connected to a pressure gradient

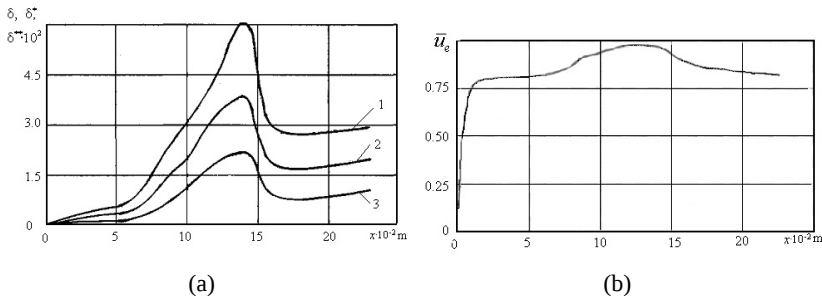


Fig. 1: Distribution of a boundary layer thickness δ -1, displacement thickness δ^* -2, momentum thickness $\delta^{**} \cdot 10^2$ -3 (a) and settlement relative velocity $\bar{u}_e = \frac{u}{u_e}$ on an outer boundary of a boundary layer (b) on length cylinder-conic body [1]

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right)_{y=0} = \frac{d\bar{P}}{dx},$$

that the large dependence of a limit of stability on the form of a structure of speed equivalent to large effect of a pressure gradient on stability. Thus, the speed in the field of a central cylindrical part increases (see fig. 1b), therefore, pressure and derivative $\frac{d\bar{P}}{dx}$ decrease, i.e. the boundary-layer flow tests for a surface effect of a negative gradient of pressure. The effect of a pressure gradient can be described by some dependence of a critical number Re (limit of stability) from dimensionless the formparameter $\Phi = \left(\frac{\delta^2}{\nu} \right) \frac{du_e}{dx}$, which defines a structure of speed in a boundary layer. Knowing the dependence $Re_{cr. min}^* = f(\Phi)$, it is possible to find the provision of an instability point on a streamlined body. For this purpose it is necessary to define parameters of an inviscid flow and to find distribution of speeds $u_e(x) = \Phi$ (fig. 1b), then to calculate

parameters of a laminar boundary layer - width δ , conditional displacement thickness δ^* , the formparameter Φ , number $Re^* = \frac{u_e \delta^*}{\nu}$ depending on coordinate (co-ordinates) x . On the received significances it is possible to construct analytical dependence $\Phi = \Phi(Re^*)$, which cross point with theoretical dependence $\Phi = \Phi(Re_{cr. min}^*)$ will define an appropriate critical number $Re_{cr. min}^*$. Between the formparameter Φ and f there is following dependence

$$f = \left(\frac{0.1093 - \Phi}{18018} - \frac{\Phi^2}{6435} \right) \Phi.$$

In an instability point $x_{i.p}$ the local number $Re^{**}(x) = \frac{u_e \delta^{**}}{\nu}$, retrieved during account of a laminar boundary layer, becomes equal to value $Re_{cr. min}^{**}$. At increase by degree of an isotropy [2] ϵ the transition point x_{tr} comes nearer to an instability point, and only at a large degree $\epsilon 100 = 2 \text{ div } 3\%$ flow turbulences the transition point almost coincide an instability point. The average pressure gradient on a surface is defined by dependence:

$$\bar{K} = \left[\frac{1}{x_{tr} - x_{i.p}} \right] \int_{x_{i.p}}^{x_{tr}} K(x) dx,$$

where a local pressure gradient is $K(x) = \left(\frac{\delta^{**2}}{\nu} \right) \frac{du_e}{dx}$.

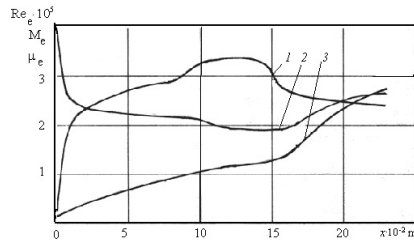


Fig. 2: Distribution of parameters of a boundary layer on length cylinder-conic body: 1 - M_e ; 2 - μ_e ; 3 - $Re_e \cdot 10^5$ 1/m

In the field of pressure drop on a cylindrical part ($\bar{K} > 0$) the difference between numbers Re in a transition point and in an instability point is much more, than in the field of ascending pressure $\bar{K} < 0$. The transition point is defined by a way presence of an instability point, account of a potential flow of a contour and laminar boundary layer. It is in addition necessary to calculate conditional momentum thicknesses of number Re^{**} and local pressure gradients K . After presence of an instability point $x_{i.p}$ the dependence $K = K(x)$ on a reputed plot $x_{tr} - x_{i.p}$ is defined, for which calculate some average values \bar{K} . As a measure of distance between a transition point and instability point the appropriate differences $Re^{**} - Re_{cr. min}^{**}$ are calculated. Using dependence $\bar{K} =$

$\bar{K} (Re_{cr}^{**} - Re_{cr.min}^{**})$ and the difference of Reynold's numbers $Re^{**} - Re_{cr.min}^{**}$, is the provision of a transition point x_n . Besides for account of the provision of a transition point on a contour with fractures forming depending on an initial turbulence level of a flow it is possible to use a ratio:

$$Re_{cr}^{**} = Re_{cr.min}^{**} + C (|f_s| + f)^{\frac{1}{2}} / \epsilon^{\frac{5}{4}} \tag{2}$$

where $f_s = \left(\frac{du_e}{dx}\right) \frac{\delta^{**}}{\nu} = -0.089$ significance the formparameter of a boundary layer in a point of the avulsion; $C = 1.88$ - constant. The provision of a transition point from (3) is defined on retrieved as a result of the numerical solution of equations of a boundary layer to significances $Re^{**}(x)$, and also the formparameter $f(x)$ for a laminar-flow layer. For the calculated parameters on (2) the significance of a critical number Re_{cr}^{**} is defined and the equation of a kind $Re_{cr}^{**}(x) = Re_{cr}^{**}$ is decided, the significance of which radical is coordinate of a transition point. The extent of a area from an instability point prior to the beginning transition is defined by intensity of increase in amplitudes of velocity pulsations downstream, which pursuant to a technique [2] depends on local numbers $Re^* = \frac{u_e \delta^*}{\nu}$. The dependence of the attitude of amplitudes of fluctuations $\frac{A}{A_0}$ from number Re^* (where A_0 - amplitude of fluctuations in an instability point is approximated by functions:

$$\begin{cases} A/A_0 = \exp(a + bRe^* + cRe^{*2}); & Re_{cr.min}^* < Re^* < Re_1^*; \\ A/A_0 = \exp(a + bRe_1^* + e(Re^* - Re_1^*)); & Re^* \geq Re_1^*; \\ Re_{cr.min}^* < Re_1^* < Re_{cr}^* \end{cases} \tag{3}$$

Here number Re_{cr}^* corresponds with the beginning of a transition zone [5]. Conditions of equality of amplitude to its reference value at $Re^* = Re_{cr.min}^*$ and coordination of dependences (3) on significances $\ln(A/A_0)$ and first derivative $\partial[\ln(A/A_0)]/\partial Re^*$ at $Re^* = Re_1^*$, $A = A_0$;

$$(A/A_0)_1 = \exp(a + bRe_1^* + cRe_1^{*2}); b + 2cRe_1^* = e$$

serve initial for definition of factors

$$\begin{cases} a = -bRe_{cr.min}^* - cRe_{cr.min}^{*2}; & b = e - 2cRe_1^* \\ c = \left[e(Re_1^* - Re_{cr.min}^*) - \ln(A/A_0)_1 \right] (Re_1^* - Re_{cr.min}^*)^{-2} \end{cases}$$

The values $e, Re_1^*, \ln(A/A_0)$ - are functions Φ :

$$\begin{cases} e = 0.00664 + 0.00424\text{th}[0.41(-1.5 - \Phi)]; \\ Re_1^* = 5000 + 3287\text{arctg}(\Phi - 2.6); & \Phi \geq 0; \\ Re_1^* = 5000 + 4580\text{th}[-0.506(\Phi - 2.6)], & \Phi > 0; \\ (A/A_0)_1 = \exp(3.56 + 2.36\text{th}[0.458(\Phi - 2.6)]) \end{cases}$$

The provision of a beginning of a transition zone corresponds to that point on a surface of a body, in which the significance of amplitude of fluctuations calculated on parities (3), will reach critical significance. At a known roughness for a body of the preset form [1] account of the provision of transition of laminar flow in turbulent consist in calculation of local numbers Re^{**} and also parameters f and $\frac{h}{\delta^{**}}$ for a laminar boundary layer depending on coordinate x , read out from a forward stagnation point of a body. Is noted, that the effect of surface roughness on transition of a laminar boundary layer in turbulent at hypervelocity's of a flow is much weaker, and at high Mach numbers the laminar-flow layer is saved at the much greater roughness, than in incompressible currents (critical height of a roughness in 3-7 times is higher). The boundary layer in the compressed environment is less sensitive to a roughness, than in an incompressible flow. The turbulent layer is tolerant to a roughness, if height of an element of a roughness is less than a laminar sub layer thickness.

REFERENCES

- [1] Sidnyaev N.I. Calculation method for unsteady flow past a body of revolution with surface mass transfer based on parabolized Navier - Stokes equations *Mathematicheskoe Modelirovanie*. -2004, - Vol.16, No, 5. - P. 55-65.
- [2] *Turbulent flows and heat transfer*. Under edit. Lin Tzya-tzyao. M.: the foreign literature, 1963. - 564 p.
- [3] Schlichting H. *Rise of turbulence* With ihm.; Under edit. L.G. Loitzanskii. M.: the foreign literature, 1962. - 202 p.
- [4] *Unsteady aerodynamics of ballistic flight* Yu.M. Lipnitskii, A.V. Krasilnikov, A.N. Pokrovskii etc.; Under edit. Lipnitskii Yu.M. -M.: FIZMATLIT, 2003. - 176 p.
- [5] Sidnyaev N.I. *Studying the influence of holders on bottom pressure in models of hypersonic aircraft* *Technical physics letters*, 2013, Vol. 39, № 4, pp. 367-369.

**Суперкомпьютерные технологии
математического моделирования**

Вторая международная конференция

Труды конференции

Печатается в авторской редакции
Компьютерная верстка П. А. Попов
Оформление обложки П. Е. Захаров

Подписано в печать 09.01.2014. Формат 70x108/16.
Печать цифровая. Печ. л. 23,8. Уч.-изд. л. 29,75. Тираж 100 экз. Заказ № 4.
Издательский дом Северо-Восточного федерального университета
677891, г. Якутск, ул. Петровского, 5.

Отпечатано в типографии ИД СВФУ