

# Грант РФФИ №14-01-00296 «Численное решение уравнений Навье-Стокса для жидкости с растворением-выделением газа»

**Руководитель:** чл.-корр. РАН Шайдуров В.В.

1. Создана одномерная математическая модель, описывающая динамику вертикального распределения концентрации растворенного газа с учетом температуры и давления при поглощении – выделении газа через поверхность без спонтанного выделения газа. Новыми являются ее настройки и соответствующие решения с учетом реальных данных по глубине, температуре и высокой растворимости таких газов как сернистый ангидрид и сероводород (как подземные флюиды), аммиак (как продукт животноводства), углекислый газ.

2. Для численного решения двумерных уравнений конвекции для вязкой несжимаемой жидкости (включая уравнения Навье-Стокса) с уравнением состояния в приближении Буссинеска алгоритмически реализована комбинация пошаговой по времени полу-лагранжевой аппроксимации совокупности производных, описывающих перенос субстанций (компонент скорости, температуры и концентрации газа) и конформного метода конечных элементов для остальных слагаемых.

Рассмотрим сущность новой модификации полу-лагранжевой аппроксимации уравнений Навье-Стокса.

Пусть на слое  $t_k = \tau k$  задана базисная функция  $\varphi(x, y)$  метода конечных элементов в ячейке  $\omega$ . Построим объем  $V$ , ограниченный траекториями, исходящими из границы ячейки  $\omega$  (рисунок 1):

$$\begin{cases} \frac{d\hat{x}}{dt} = u(t, \hat{x}, \hat{y}), \\ \frac{d\hat{y}}{dt} = v(t, \hat{x}, \hat{y}), \end{cases} \quad t_k \geq t \geq t_{k-1},$$

где  $u$  и  $v$  – компоненты скорости (двумерного) течения.

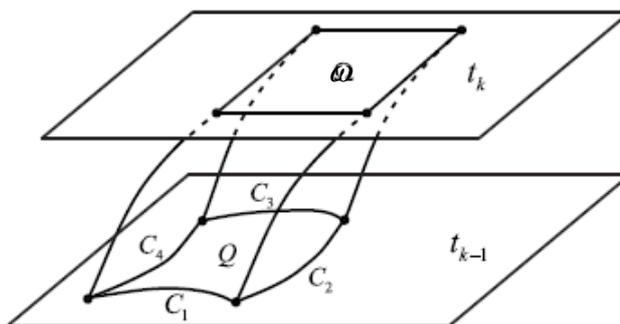


Рисунок 1 – Объем  $V$  с верхней гранью  $\omega$  и нижней гранью – криволинейным четырехугольником  $Q$

Построим функцию  $\theta(t, x, y)$  как решение уравнения

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial y} = 0, \quad t \in [t_{k-1}, t_k],$$

$$\theta(t_k, x, y) = \varphi(x, y).$$

Функция  $\theta(t, x, y)$  постоянна вдоль траекторий, так что она легко определяется как

$$\theta(t, \hat{x}(t), \hat{y}(t)) = \varphi(\hat{x}(t_k), \hat{y}(t_k)), \quad t \in [t_{k-1}, t_k].$$

Возьмем одно из уравнений Навье-Стокса

$$\frac{D(\rho u)}{Dt} + \frac{\partial P}{\partial x} - \mu \Delta u = 0,$$

где

$$\frac{Da}{Dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\partial(ua)}{\partial x} + \frac{\partial(va)}{\partial y}$$

для произвольной функции  $a$  и умножим его на  $\theta(t, x, y)$ . Благодаря свойству

$$\theta \frac{D(\rho u)}{Dt} = \frac{D(\theta \rho u)}{Dt}$$

получаем

$$\frac{D(\theta \rho u)}{Dt} + \theta \frac{\partial P}{\partial x} - \mu \theta \Delta u = 0.$$

При интегрировании по объему  $V$  используем формулу Гаусса-Остроградского для  $D(\theta \rho u)/Dt$  и отметим, что все интегралы по боковым граням  $V$  обратятся в нуль:

$$\int_V \left( \frac{D(\theta \rho u)}{Dt} + \theta \frac{\partial P}{\partial x} - \mu \theta \Delta u \right) dV = \int_{\omega} \rho u \theta d\Omega \Big|_{t=t_k} - \int_Q \rho u \theta dQ \Big|_{t=t_{k-1}} + \int_V \left( \frac{\partial P}{\partial x} - \mu \Delta u \right) \theta dV = 0.$$

После применения квадратурной формулы по  $t$  и деления на шаг  $\tau$  получаем приближенное равенство

$$\int_V \left( \frac{\rho u}{\tau} + \frac{\partial P}{\partial x} - \mu \Delta u \right) \varphi dV|_{t=t_k} = \int_Q \frac{\rho u \theta}{\tau} dQ|_{t=t_{k-1}}.$$

Из набора таких равенств на каждой ячейке вытекает интегральное равенство

$$\int_V \left( \frac{\rho u}{\tau} \varphi + \frac{\partial P}{\partial x} \varphi + \mu \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) dV|_{t=t_k} = \int_Q \frac{\rho u \theta}{\tau} dQ|_{t=t_{k-1}}.$$

В итоге в левой части получается формулировка конформного метода конечных элементов, улучшенная за счет отсутствия первых производных, а в правой части – интеграл от функций, известных на предыдущем временном слое  $t_{k-1}$ .

Аналогичная дискретизация по времени проводится для другой компоненты скорости, температуры (и если необходимо, для концентрации газа).

Ясно, что решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений и интегрирование по криволинейному четырехугольнику  $Q$  осуществляется приближенно с необходимым порядком точности.

В случае, если  $u$  и  $v$  еще не известны на слое  $t_k$ , то проводятся итерации по нелинейности с начальным приближением, взятым с предыдущего слоя примерно вдоль траекторий.

Таким образом, для численного решения двумерных уравнений Навье-Стокса для вязкой жидкости новым является способ самой лагранжевой аппроксимации. Вместо аппроксимации совокупности конвективных слагаемых разностью назад по времени предложено интегрирование по специальным объемам, ограниченными траекториями частиц в трехмерном пространстве элементов  $(t, x, y)$ . В итоге полу-лагранжева аппроксимация стала обеспечивать консервативность переносимых субстанций, а дискретизация остальных слагаемых уравнений Навье-Стокса на искомом временном слое по-прежнему осуществляется стандартным конформным методом конечных элементов. Относительно новым является применение на границе вычислительной области более перспективных краевых условий, известных в зарубежной литературе под названием «do nothing».

Предложенная модификация пошаговой по времени полу-лагранжевой аппроксимации совокупности производных, описывающих перенос субстанций в двумерных уравнениях Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости, превышает по эффективности известные в мировой практике подходы и реализации ввиду выполнения консервативности переносимых субстанций. Гибкость предложенной модификации

позволит в будущем использовать конформные конечные элементы произвольной степени с обоснованием устойчивости и порядка аппроксимации. Построенные дискретизации свободны от ограничения Куранта на соотношение шагов по времени и пространству ввиду адаптируемых шаблонов.

Проведена большая работа по программной реализации разных алгоритмических модификаций полу-лагранжевой аппроксимации в двумерном случае, в том числе на высокопроизводительных вычислительных кластерах, имеющих в распоряжении исполнителей, с применением технологий OpenMP и CUDA. Выявлены значительные трудности оптимизации практических вычислений с помощью технологии CUDA с помощью графических ускорителей общего назначения.

3. Созданы малоразмерные математические модели, описывающие многолетнюю динамику вертикальных распределений гидрофизических характеристик соленых озер (температура, соленость, плотность) с учетом образования и таяния льда. Разработанные математические модели позволяют: оценить сезонные изменения вертикальных распределений температуры и солености воды в озерах в зависимости от метеоусловий; оценить динамику термоклина и халоклина в зависимости от стратификации и метеоусловий; определить возможность распространения слоя конвективного перемешивания до дна.

Реализована соответствующая компьютерная модель, основанная на одномерном приближении по пространству в виде уравнений в частных производных параболического типа, для расчетов сезонных изменений вертикальных распределений температуры и солености воды в стратифицированном озере с учетом образования и таяния льда. Характерная ветровая скорость течения воды находится по модели Экмана с формулой Прандтля-Обухова для коэффициента вертикального турбулентного обмена. Результаты расчетов хорошо согласуются с данными натурных измерений на озере Шира, включая возможность выхода сероводорода на поверхность при перемешивании до дна.

В реализованной одномерной модели многолетней динамики вертикальных распределений гидрофизических характеристик новыми являются как ее настройки на соленые меромиктические озера, в которых в течение как минимум одного года водная толща не перемешивается до дна, так и ее численные решения. В непроточных водоемах формируются верхний (эпилимнион) и глубинный (гиполимнион) слои, в которых градиенты плотности малы. Между ними располагается слой воды (металимнион) с большим градиентом плотности (рисунок 2).

Предлагаемые численные модели вертикальной структуры стратифицированных водоемов соответствуют мировому уровню математического моделирования гидрофизики озер.

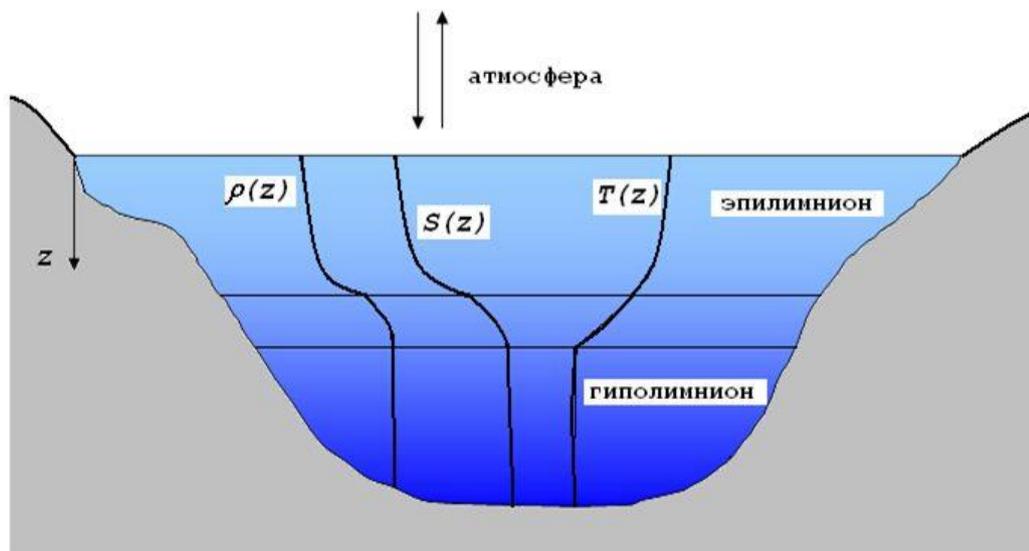


Рисунок 2 – Стратифицированное озеро

4. Впервые проведены расчеты формирования одной или двух циркуляционных зон в зависимости от плотностной стратификации и силы ветра. Для двухслойной модели озера предложен критерий смены режимов ветровых течений (нарушения меромиктии бессточного озера). Из условия превышения фазовой скорости внутренних волн характерной скоростью течения воды, влекущей нарушение меромиктии, получена простая формула для определения условий смены режимов ветровых течений в стратифицированных озерах. Впервые проведены расчеты по определению величины ветра, при котором нарушается меромиктия озера Шира.

В непроточном водоеме под действием ветра образуются ветровые течения. Возможны два типа ветровых течений (в вертикальной плоскости): в зависимости от плотностной стратификации и силы ветра формируются одна или две циркуляционные зоны (рисунок 3).

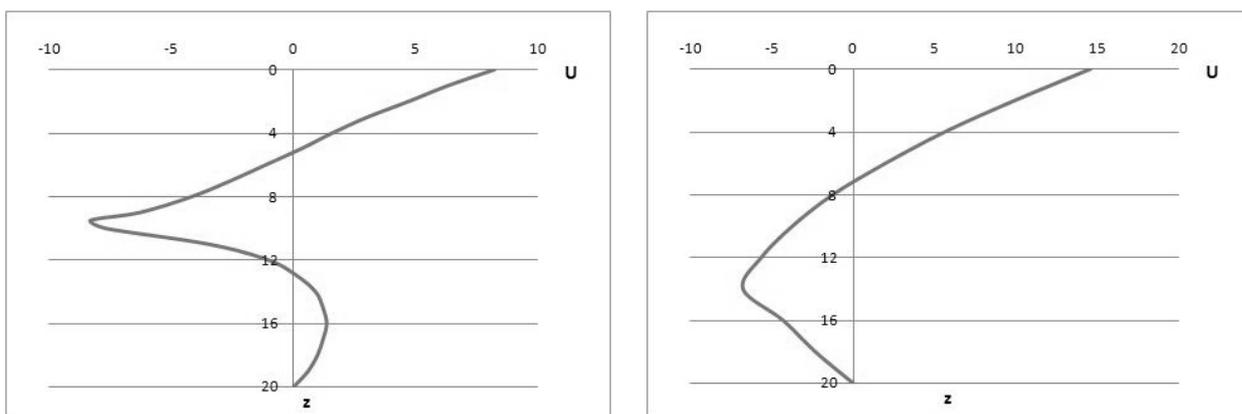


Рисунок 3 – Вертикальный профиль горизонтальной составляющей скорости течения для меромиктического водоема (слева), для случая перемешивания до дна (справа)

Объект для сравнения численных моделей, разрабатываемых в проекте и данных наблюдений – озеро Шира (рисунок 4). Озеро Шира - солончатый водоем площадью

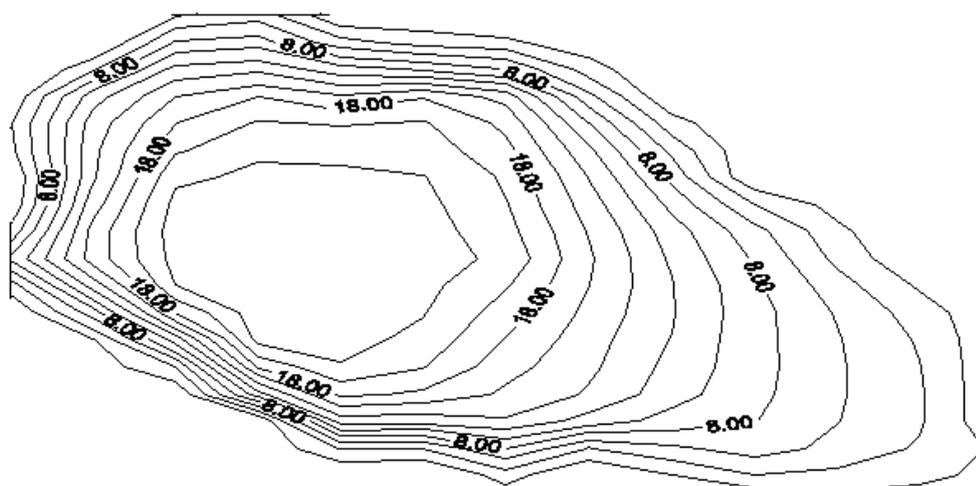


Рисунок 4 – Батиметрия озера Шира (м)

39.5 км<sup>2</sup>, максимальная глубина превышает 23.8 м. Состав воды сульфатно-хлоридный натриево-магниевый. В летнее время, когда наблюдается наиболее выраженная плотностная стратификация, минерализация по глубине составляет от 15 до 19 г/л. Вода и грязевые отложения озера обладают бальнеологическими свойствами; на берегу озера функционирует популярный курорт «Озеро Шира».

## Публикации

1. E.V. Dement'eva, E.D. Karepova, V.V. Shaidurov, Assimilation of observation data in the problem of surface wave propagation problem in a water area with an open boundary // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. – 2014. – 29:1. – P. 13-23.
2. В.В. Шайдуров, С.В. Шуть. Применение эрмитового биквадратного конечного элемента // Вестник СибГАУ. – 2014. – № 2(54). – С. 80-85.
3. Dementyeva E., Karepova E., Shaidurov V. Inverse Problem of a Boundary Function Recovery by Observation Data for the Shallow Water Model // Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Numerical Mathematics and Advanced Applications – ENUMATH 2013. – Springer International Publishing, 2015. – V. 103. – P. 499-507.
4. Dementyeva E., Karepova E., Shaidurov V. Effectiveness of the parallel implementation of the finite element method for the problem of the surface waves propagation // Lecture Notes in Computational Science. – Springer-Verlag, 2015 (принята к печати).
5. Дементьева Е.В., Каропова Е.Д. Эффективность параллельной реализации метода конечных элементов для задачи распространения поверхностных волн // Седьмая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям. Материалы конференции / Под ред. проф. А.В. Старченко. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2014. – С. 42-47.
6. Вяткин А.В., Ефремов А.А., Каропова Е.Д., Шайдуров В.В. Параллельная реализация модифицированного метода траекторий для уравнения неразрывности // Седьмая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям. Материалы конференции / Под ред. проф. А.В. Старченко. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2014. – ISBN 978-5-7511-2063-4. – С. 5-13.
7. Белолипецкий В.М., Белолипецкий П.В. О критерии смены режимов ветровых течений в стратифицированных озерах // Труды VIII Международной научно-практической конференции «Динамика и термика рек, водохранилищ и прибрежной зоны морей», Т. 1. – Москва: РУДН, 2014. – С. 16-24.
8. E.V. Dementyeva, E.D. Karepova, The numerical recovery of the boundary function for the tidal models // Abstracts. The International conference “Advanced mathematics, computations and applications-2014”. – Novosibirsk: Academizdat, 2014. – P. 55.
9. E.D. Karepova, E.V. Dementyeva, The numerical recovery of the boundary function for the tidal models on SMP cluster // Sixth Conference on Finite Difference Methods: Theory and Applications – FDM'14. Abstracts. – Bulgaria, University of Rouse, 2014. – P. 20.
10. Karepova E.D., Dementyeva E.V. The parallel implementation of the numerical solution of the inverse problem of boundary function recovery for the tidal models // Sixth

International Conference on Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences. Book of abstracts. – Euro American consortium, 2014. – P. 27-28.

11. Efremov A.A., Karepova E.D., Shaydurov V.V., Vyatkin A.V. Parallel implementation of Semi-Lagrangian method for advection equation // Sixth Conference on Finite Difference Methods: Theory and Applications – FDM 14. Abstracts. – Bulgaria, University of Rouse, 2014. – P. 21.

12. A.V. Vyatkin, V.V. Shaydurov Theoretical Justification of Integral Semi-Lagrangian Scheme // Abstracts. The International conference “Advanced mathematics, computations and applications-2014”. – Novosibirsk: Academizdat, 2014. – P. 15-16.

13. Вяткин А.В. Полу-Лагранжева численная схема, основанная на трансформировании области интегрирования // XV Всероссийская конференция молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям. Программа и тезисы докладов. – Тюмень, 2014. – С. 25.

14. Якубович М.В. Численное моделирование течений газа в канале с обратным уступом // Тезисы докладов IV Всероссийской конференции «Математическое моделирование и вычислительно-информационные технологии в междисциплинарных научных исследованиях». Иркутск, Россия. 30 июня – 04 июля 2014 г. – Иркутск: РИО ИДСТУ СО РАН, 2014 – С. 75.

15. Якубович М.В. Расчет сверхзвуковых течений газа в канале // Решетневские чтения: материалы XVIII Междунар. науч. конф., посв. 90-летию со дня рождения генер. конструктора ракет.-космич. систем акад. М. Ф. Решетнева (11–14 ноября 2014 г., г. Красноярск): в 3 ч. / под общ. ред. Ю. Ю. Логинова; Сиб. гос. аэрокосмич. ун-т. – Красноярск, 2014. – Ч. 2 – С. 173.