

# ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РЕТРОСПЕКТИВНОЙ МОДЕЛИ ТЕПЛОВОЙ КОНВЕКЦИИ ВЫСОКОВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ\*

И.А.ЦЕПЕЛЕВ

*Институт математики и механики УрО РАН, Екатеринбург*

e-mail: tsepelev@imm.uran.ru

А.И.КОРОТКИЙ

e-mail: korotkii@imm.uran.ru

The issues of numerical modeling of the retrospective problem of thermal convection of a high inhomogeneous incompressible conducting fluid are considered. These models are used, for example, when studying the processes of evolution of sedimentary basins and salt diapirs in the crust, heat convection in the Earth's mantle, the movement of continents under the influence of mantle flow and many other problems in geophysics. The numerical simulation of the retrospective problems for these models is a relatively new direction in the field of geodynamics. Attention to these problems is increasing due to the increased performance of modern computers and the expanding range of applications. A mathematical model thermoconvective flow of highly viscous fluid in the backward direction in time includes the boundary value problem to determine of the velocity field and the final value problem to determine the temperature. To get quality results of the numerical implementation of the problem should be carried out on a sufficiently fine mesh with the involvement of multiprocessor computers. Sufficiently effective methods and algorithms for numerical simulation of problems that would break it up into several independent subproblems and solve them in parallel were developed. The results of numerical simulation of the restoration of the temperature field in the Japan Sea during preceding 30 million years will be presented.

## **Введение.**

Рассматривается задача численного моделирования тепловой конвекции высоковязкой неоднородной несжимаемой теплопроводной жидкости в обратном направлении времени. Привлечение моделей механики высоковязкой жидкости для моделирования различных процессов в недрах Земли получило широкое распространение, как в России, так и за рубежом [1-14]. Подобные модели используются, например, при изучении процессов эволюции осадочных бассейнов [9], [11] и соляных диапиров [13], [14] в земной коре, тепловой конвекции в мантии Земли [1-8], движения континентов под действием мантийных течений [10] и ряда других задач геофизики. Динамика солевых комплексов привлекает пристальное внимание геологов и геофизиков, в особенности специалистов по деформациям осадочных пород, горных инженеров, разведчиков недр и инженеров по подземным сооружениям. Это связано с тем, что подобные структуры могут приводить к обвалам, создавать ловушки для углеводородов, являться хранилищами радиоактивных отходов. Исследование, к примеру, соляных куполов важно для

---

\*Работа выполнена по Программе фундаментальных исследований Президиума РАН № 14 при поддержке УрО РАН (проект 09-П-1-1003) и поддержана Региональной целевой программой по развитию вычислительных, телекоммуникационных и информационных ресурсов УрО РАН (проект РЦП-11-П8).

народного хозяйства, т.к. практически все нефтегазовые резервы планеты связаны с соляными структурами. Чтобы понять историю осадконакопления, эрозии и деформации в осадочных бассейнах, необходимо реконструировать эволюцию бассейна в обратном времени. Большой интерес представляет трехмерное моделирование процесса зарождения, развития и формирования теплового мантийного диапира (плюма), вызванного внутренней гравитационной неустойчивостью неоднородной среды [12], [13]. Совершенствование методов сейсмической томографии земных недр и других методов позволяет получать более детальную информацию о строении Земли. Привлечение математического моделирования для анализа геолого-геофизических данных приводит к лучшему пониманию природных явлений. Решение обратных задач [15-17] в рамках данных математических моделей с помощью методов решения некорректных задач является новым направлением исследований в области геодинамики. Интерес к таким задачам возрастает в связи с увеличением производительности современных ЭВМ, развитием программных средств и расширяющимся кругом приложений. Совместный анализ геофизических данных и результатов численного моделирования приводит к лучшему пониманию природы явлений.

#### Математическая модель ретроспективной задачи.

Математическая модель термоконвективных течений высоковязкой ньютоновской неоднородной несжимаемой жидкости в обратном направлении времени в приближении Буссинеска включает в себя краевую задачу для определения поля скоростей [18], [19]

$$\nabla p = -\nabla \left[ \eta(T) \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \right] + \mathbf{F}(T), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1)$$

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \partial \mathbf{u}_\tau / \partial \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial \Omega_1, \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_0, \quad \mathbf{x} \in \partial \Omega_2, \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3)$$

$$\partial T / \partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla^2 T + f(t, \mathbf{x}), \quad t \in [0, \vartheta], \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (4)$$

$$\sigma_1 T + \sigma_2 \partial T / \partial \mathbf{n} = T_*, \quad t \in [0, \vartheta], \quad \mathbf{x} \in \partial \Omega, \quad (5)$$

$$T(\vartheta, \mathbf{x}) = \chi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial \Omega. \quad (6)$$

Здесь  $\Omega$  — модельная область,  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ ;  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$  — вектор скорости движения жидкости;  $\mathbf{F}(T)$  — вектор внешних массовых сил;  $\mathbf{n}$  — единичный вектор внешней нормали в точках границы  $\partial \Omega$  области  $\Omega$ ;  $p$  — давление;  $\eta$  — вязкость;  $\partial \mathbf{u}_\tau / \partial \mathbf{n}$  — проекция вектора скорости на касательную плоскость в точках границы;  $\nabla$  — операция взятия градиента;  $\nabla \cdot$  — операция взятия дивергенции;  $\nabla^2$  — оператор Лапласа;  $T$  — температура;  $f$  — плотность внутренних источников тепла;  $\sigma_1, \sigma_2$  — некоторые кусочно-гладкие неотрицательные функции на  $\partial \Omega$  ( $\sigma_1^2 + \sigma_2^2 > 0$ ). Исходной информацией для решения задачи является функция  $\chi(\cdot)$ . Физические параметры жидкости (температура, скорость, давление, вязкость, плотность) считаются переменными, зависящими от времени и пространственных координат. Вязкость и плотность зависят от температуры. Соотношения (1)-(6) приведены в безразмерном виде. Подробно переход к безразмерным уравнениям рассмотрен в [20].

Ретроспективная задача естественной тепловой конвекции формулируется следующим образом: найти поле скоростей  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ , давление  $p = p(t, \mathbf{x})$  и температуру  $T = T(t, \mathbf{x})$ , удовлетворяющие при в области задачам (1)-(3) и (4)-(6). Хорошо известно, что ретроспективная задача естественной тепловой конвекции является некорректной и требует для численного решения привлечения методов регуляризации. В пакетах

инженерных программ подобного рода математические модели не реализованы в виде программного кода (решателя). Для реализации таких моделей необходимо разработать алгоритм численного решения, обладающий свойством устойчивости к малым возмущениям исходных данных и неизбежно возникающей численной погрешности в проведении вычислений. Численное моделирование подобных задач, равно как и большинства задач математической физики, сопряжено с большими объемами вычислений и привлечением больших вычислительных ресурсов. Для получения качественных результатов необходимо проводить расчеты на достаточно мелких сетках, что и приводит к некоторым дополнительным и повышенным требованиям к вычислительному устройству. Такие вычисления имеет смысл проводить на многопроцессорных вычислительных системах. Они являются мощным и эффективным инструментом в решении подобных задач. Однако для их использования необходимо разработать соответствующие методы и алгоритмы, которые позволят разбить исходную задачу на несколько независимых частей (подзадач) и решать их параллельно.

#### Алгоритм решения ретроспективной задачи.

Назначим момент времени  $t = \vartheta$  стартовой точкой начального этапа вычислений. Выберем достаточно малый отрезок времени  $[t_l, \vartheta]$ ,  $t_l > 0$ , и зададим разбиение  $\{t_k = t_l + \tau k, k = 0, \dots, K; \tau K = \vartheta - t_l\}$ . Символом  $T^k$  будем обозначать значение соответствующей сеточной функции  $T$  в момент времени  $t_k \in [t_l, \vartheta]$ . Для момента времени  $t = \vartheta$  решением задачи (1)-(3) находится распределение поля скоростей  $\mathbf{u}(\vartheta, \cdot)$  и полагается  $\mathbf{u}(t, \cdot) = \mathbf{u}(\vartheta, \cdot)$ . Поставим в соответствие задаче (4), (5) ее дискретный аналог, который в операторном виде можно записать в виде двухслойной неявной схемы аппроксимации конвективного (**C**) и диффузионного (**D**) членов

$$T^{k+1} = (\mathbf{E} + \tau \mathbf{C} + \tau \mathbf{D})^{-1} [T^k + \tau f^k], \quad \mathbf{E}T = T, \quad T^0 = T(t_l, \cdot). \quad (7)$$

Задача (7) реализуется в прямом времени и определяет однопараметрическое семейство решений, зависящих от параметра  $T^0$ . Основное требование к дискретным операторам **C** и **D** заключается в выполнении равенств  $\mathbf{D}^* = \mathbf{D} > \mathbf{0}$  и  $\mathbf{C}^* = -\mathbf{C}$ . Заметим, что для оператора **S**

$$0 < \mathbf{S} = (\mathbf{E} + \tau \mathbf{C} + \tau \mathbf{D})^{-1} \leq \mathbf{E} \quad (8)$$

и задача (7) будет однозначно разрешимой и устойчивой для произвольного  $\tau > 0$  [21]. Для краевой задачи (3)-(5) могут быть использованы различные способы аппроксимации дифференциальных операторов, необходимо чтобы в дискретной задаче сохранялись все физические законы, которые лежат в основе модели. Более подробно эти вопросы рассмотрены в работе [22].

Обозначим  $\mathbf{A}\varphi = T(\vartheta, \cdot; \varphi) = \mathbf{S}^K \varphi + \tau \sum_{i=1}^K \mathbf{S}^{i-1} f^{i-1}$ , где  $T(\vartheta, \cdot; \varphi)$  обозначается распределение температуры в момент времени  $t = \vartheta$ , которое реализуется для заданного поля скоростей из начального (подлежащего определению) состояния температуры  $\varphi$ . Для решения ретроспективной задачи (4)-(6) построим итерационный процесс, основанный на последовательном уточнении начального состояния из решения задачи  $\mathbf{A}\varphi = \chi$ . Для решения данного операторного уравнения используется неявный двухслойный итерационный метод

$$\mathbf{B} \frac{\varphi^{n+1} - \varphi^n}{\beta_n} = r^n, \quad r^n(\cdot) \triangleq T(\vartheta, \cdot; \varphi^n) - \chi(\cdot), \quad n = 0, 1, \dots, \quad \varphi^0(\cdot) = 0. \quad (9)$$

При этом  $\mathbf{B} = \mathbf{B}^* > 0$  и последовательность  $\beta_n$  подчиним условию  $\beta_n \rightarrow 0$ . Для стационарных операторов  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$ , устойчивость итерационного процесса определяется операторным неравенством  $\beta_n \leq 2\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{B} - \mathbf{E})$  [21]. Оператор  $\mathbf{B}$  оказывает влияние на скорость сходимости итерационного процесса (9). Его будем строить в виде  $\mathbf{B} = \mathbf{E} + \mathbf{D}$ , что обеспечит сходимость итерационного процесса в соответствующем пространстве Соболева  $W_2^1(\Omega)$ . Другими словами, удастся добиться сходимости не только самих аппроксимаций, но и их первых производных. Выбор параметра в (9) будем осуществлять методом скорейшего спуска. Он заключается в минимизации нормы

$$\beta_n = \operatorname{argmin} \left\{ \|\varphi^{n+1} - T^0\|_{\mathbf{B}}^2 : \beta_n \in (0, +\infty) \right\}, \quad \langle y^n, z^n \rangle_{\mathbf{B}} = \langle \mathbf{B}y^n, z^n \rangle,$$

где символом  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  обозначается скалярное произведение в гильбертовом пространстве  $L_2(\Omega)$  и  $\|\varphi\|^2 = \langle \varphi, \varphi \rangle$ .

В результате вычисляется последовательность приближений  $\{\varphi^n\}$  и  $\|\varphi^n\|_{\mathbf{B}} \rightarrow \|T^0\|_{\mathbf{B}}$ . Вычисления следует прекратить, когда  $J_N = \varepsilon$ , выбор параметра  $\varepsilon$  согласуется с точностью решения задачи (4), (5). Например, можно предложить выбирать  $\varepsilon$  равным квадрату диаметра сетки расчетной области, если методы дискретизации дифференциальных операторов в (4) и (5) теоретически имеют второй порядок точности. Примем  $\varphi^N$  за аппроксимацию искомой температуры в момент времени  $t = t_i$ . Данный момент времени будет определять стартовую точку очередного этапа вычислений. Все описанные действия будут повторяться до тех пор, пока возможен выбор  $t_i > 0$ .

#### **Программная реализация ретроспективной задачи.**

Пакет программ OpenFOAM (Open Source Field Operation And Manipulation) предназначен для проведения численных расчетов широкого спектра моделей механики жидкости и газа [23], [24]. Этот проект с открытым кодом разрабатывается фирмой OpenCFD Limited и является аналогом таких коммерческих инженерных пакетов программ как ANSYS (компании ANSYS Inc.) и некоторых других аналогичных пакетов для численного моделирования физических процессов, происходящих в жидких и газовых средах. Интерес к пакетам инженерных вычислений постоянно возрастает. Это обусловлено расширением круга прикладных задач в различных областях человеческих знаний, которые могут быть численно реализованы на современных ЭВМ. Также идет развитие средств коммуникации и развитие вычислительных комплексов. OpenFOAM - свободно распространяемый пакет инженерных программ для проведения численных расчетов механики сплошной среды. В его разработке принимают участие десятки научных организаций. Он представляет собой открытую объектно ориентированную платформу, реализованная на языке программирования C++, обладает большой функциональностью и удовлетворяет требованиям, предъявляемым к пакетам прикладных программ, допускает реализацию приложений на мультипроцессорных кластерах. По содержанию он представляет собой библиотеку классов языка C++ для операционной системы Linux, в которой реализованы процедуры решения дифференциальных уравнений с частными производными в произвольной пространственной области. Для организации параллельных вычислений с состав дистрибутива включается пакет OpenMPI. Для обработки результаты вычислений импортируется в формат данных VTK (Visual ToolKit) и могут обрабатываться системами визуализации открытого доступа.

Для демонстрации описанного алгоритма представим результаты восстановления температурного поля коры и верхней мантии в районе Японского моря в геологическом прошлом. Температура (левый кадр рисунка), которая служит исходной информацией

для решения обратной ретроспективной задачи, восстановлена по данным сейсмической томографии [25].

Для моделирования были использованы следующие параметры: размеры модельной области [4000, 4000, 800] км;  $F(T) = RaT$ , число Рэлея  $6 \cdot 10^5$ . На верхней грани модельной области задавались скорости движения среды, на остальных гранях задавались условия идеального скольжения с непроницаемостью. Вязкость распределялась по закону Аррениуса. Для температуры на верхней и нижней гранях фиксировались значения 300К и 2000К соответственно, на боковых гранях определялись условия теплоизоляции. Внутренними источниками тепла пренебрегаем. Исходная задача (1)-(6) дискретизировалась  $150 \times 150 \times 150$  конечными объемами. На рисунке оттенками синего цвета представлена температурная аномалия  $\delta T = (T - T_{middle})/\Delta T$ ,  $\Delta T = 1700$ К, соответствующие значениям  $\delta T$  равным  $[-0.05, -0.07]$ . Данная температурная аномалия определяет местоположение вещества, имеющего более низкую температуру по отношению к температуре окружающего вещества. Оттенками красного цвета  $[+0.05, +0.07]$  представлены слои более горячего вещества в мантии. На правом кадре рисунка представлена температурная аномалия, восстановленная на момент времени в 30 млн. лет назад. Расчеты выполнены на мультипроцессорном комплексе "УРАН" (Институт математики и механики УрО РАН).

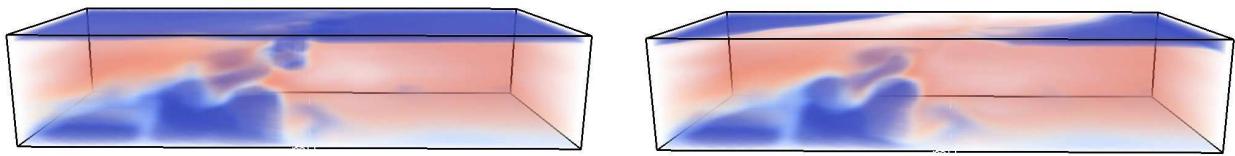


Рис. 1. Расчет модельного примера.

## Список литературы

- [1] MCKENZIE D.P., ROBERTS J.M., WEISS N.O. Convection in the Earth's mantle: towards a numerical simulation // J. Fluid Mech. 1974. V. 62. P. 465-538.
- [2] FRICK H., BUSSE F.H., CLEVER R.M. Steady three-dimensional convection at high Prandtl number // J. Fluid Mech. 1983. V. 127. P. 141-153.
- [3] HOUSEMAN G. The dependence of convection planform on mode of heating // Nature. 1988. V. 332. P. 346-349.
- [4] CSEREPES L., RABINOWICZ M., ROSEMBERG-BOROT C. Three-dimensional convection in a two-layer mantle // J. Geophys. Res. 1988. V. 93. P. 12009-12025.
- [5] TRAVIS B., OLSON P., SCHUBERT G. The transition from two-dimensional to three-dimensional planforms in infinite-Prandtl-number thermal convection // J. Fluid Mech. 1990. V. 216. P. 71-91.
- [6] CHRISTENSEN U., HARDER H. 3-D convection with variable viscosity // Geophys. J. Int. 1991. V. 104. P. 213-226.
- [7] OGAWA M., SCHUBERT G., ZEBIB A. Numerical simulation of three-dimensional thermal convection in a fluid with strongly temperature-dependent viscosity // J. Fluid Mech. 1991. V. 233. P. 299-328.

- [8] TACKLEY P.J. Effects of strongly temperature-dependent viscosity on time-dependent, three-dimensional models of mantle convection // *Geophys. Res. Lett.* 1993. V. 20. P. 2187-2190.
- [9] ИСМАИЛ-ЗАДЕ А.Т., ЛОВКОВСКИЙ А.И., НАЙМАРК Б.М. Гидродинамическая модель формирования осадочных бассейнов в результате образования и последующего фазового перехода магматической линзы в верхней мантии // *Вычисл. сейсмология.* М.: Наука, 1994. Вып. 26. С. 139-155.
- [10] РЫКОВ В.В., ТРУБИЦЫН В.П. Численное моделирование трехмерной мантийной конвекции и тектоники континентальных плит // *Вычисл. сейсмология.* М.: Наука, 1994. Вып. 26. С. 94-102.
- [11] ИСМАИЛ-ЗАДЕ А.Т., КОРОТКИЙ А.И., НАЙМАРК Б.М. и др. Реализация трехмерной гидродинамической модели эволюции осадочных бассейнов // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1998. Т. 38. N 7. С. 1190-1203.
- [12] ИСМАИЛ-ЗАДЕ А.Т., КОРОТКИЙ А.И., НАЙМАРК Б.М. и др. Численное моделирование трехмерных вязких течений под воздействием гравитационных и тепловых эффектов // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2001. Т. 41. N 9. С. 1399-1415.
- [13] SCHUBERT G., TURCOTTE D.L., OLSON P. *Mantle Convection in the Earth and Planets.* Cambridge: Cambridge University Press, 2001.
- [14] ISMAIL-ZADEH A.T., TSEPELEV I.A., TALBOT C.J., KOROTKII A.I. Three-dimensional forward and backward modelling of diapirism: Numerical approach and its applicability to the evolution of salt structures in the Pricaspian basin // *Tectonophysics.* 2004. V. 387. P. 81-103.
- [15] ТИХОНОВ А.Н., АРСЕНИН В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
- [16] ЛАВРЕНТЬЕВ М.М., РОМАНОВ В.Г., ШИШАТСКИЙ С.П. Некорректные задачи математической физики и анализа. М.: Наука, 1980.
- [17] ИВАНОВ В.К., ВАСИН В.В., ТАНАНА В.П. Теория линейных некорректных задач и ее приложения. М.: Наука, 1978.
- [18] ЛАНДАУ Л.Д., ЛИФШИЦ Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
- [19] ЛАДЫЖЕНСКАЯ О.А. Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1970.
- [20] ИСМАИЛ-ЗАДЕ А.Т., КОРОТКИЙ А.И., ЦЕПЕЛЕВ И.А. Трехмерное численное моделирование обратной ретроспективной задачи тепловой конвекции на основе метода квазиобращения // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2006. Т. 46. № 12. С. 2279-2290.
- [21] САМАРСКИЙ А.А., ВАБИЩЕВИЧ П.Н., МАТУС П.П. Разностные схемы с операторными множителями. Минск: ЦОТЖ, 1998.
- [22] WANG Y., HUTTER K. Comparisons of numerical methods with respect to convectively dominated problem // *Int. J. Numer. Meth. Fluid.* 2001. V. 37. P. 721-745.
- [23] <http://foam.sourceforge.net/doc/Guides-a4/UserGuide.pdf> (дата обращения: 10.08.2010).
- [24] <http://foam.sourceforge.net/doc/Guides-a4/ProgrammersGuide.pdf> (дата обращения: 10.08.2010).
- [25] ISMAIL-ZADEH A., SCHUBERT G., TSEPELEV I., KOROTKII A. Thermal evolution and geometry of the descending lithosphere beneath the SE-Carpathians: An insight from the past // *Earth and Planetary Science Letters.* 2008. V. 273. Issue 1-2. P. 68-79.