

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

СУКМАНОВА Екатерина Николаевна

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА
ДИССОЦИИ ГАЗОВЫХ ГИДРАТОВ НА БАЗЕ
МНОГОМАСШТАБНОГО РАЗРЫВНОГО МЕТОДА
ГАЛЁРКИНА

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

НОВОСИБИРСК - 2010

Работа выполнена в Новосибирском государственном техническом университете

Научный руководитель: доктор технических наук,
профессор Шурина Элла Петровна
Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Кабанихин Сергей Игоревич
доктор физико-математических наук,
доцент Чёрный Сергей Григорьевич
Ведущая организация: Институт прикладной математики
им. М. В. Келдыша РАН

Защита состоится "17" сентября 2010 г в 12 часов на заседании диссертационного совета ДМ 003.046.01 по защите диссертаций на соискание учёной степени доктора наук при Институте вычислительных технологий СО РАН по адресу 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 6 (dsovet@ict.nsc.ru).

С диссертацией можно ознакомиться в специализированном читальном зале вычислительной математики и информатики ГПНТБ СО РАН.

Автореферат разослан "6" августа 2010 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор

Л. Б. Чубаров

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Объект исследования – физические процессы с фазовым переходом.

Актуальность темы. Газогидраты углеводородных газов широко распространены в природе, что обуславливает интерес к ним как к перспективному источнику энергии. В настоящее время даже наиболее интересные и доступные для исследователей поддонные скопления гидратов изучены относительно слабо, отсутствуют геофизические методики поисков и оконтуривания тел газогидратов. Решение этих проблем сдерживается в первую очередь недостаточной изученностью физических свойств гидратосодержащих пород и сложностью существующих математических моделей, описывающих процесс разложения гидратов. Основная сложность задач с фазовым переходом состоит в необходимости учёта движения границы раздела фаз; также следует учитывать, что в окрестности границы раздела фаз необходима повышенная точность решения. При решении этих задач традиционными методами на каждом шаге по времени приходится перестраивать сетку, что резко увеличивает вычислительные затраты, а следовательно, и время решения задачи. Это делает востребованными методы, позволяющие сократить время решения. Следовательно, данная работа является актуальной.

Цель работы. Моделирование физических процессов с фазовым переходом.

Основные задачи исследования:

- разработка упрощённой математической модели для моделирования процесса диссоциации газовых гидратов;
- разработка и реализация вычислительных схем многомасштабного метода конечных элементов на базе разрывного метода Галёркина для решения задач с фазовым переходом;
- проведение вычислительных экспериментов по моделированию процесса диссоциации газовых гидратов, анализ результатов экспериментов.

Методы исследования. Методы математического моделирования (разрывный метод Галёркина, многомасштабный метод конечных элементов), методы оптимизации, конструирование математических моделей.

Защищаемые научные результаты:

- Алгоритм моделирования процесса диссоциации газовых гидратов;
- Вариационные формулировки многомасштабного метода конечных элементов с использованием разрывного метода Галёркина;
- Технология построения дискретных аналогов вариационных формулировок многомасштабного метода конечных элементов с использованием разрывного метода Галёркина;
- Результаты прямого и обратного моделирования процесса диссоциации газовых гидратов.

Научная новизна. Предложена новая упрощённая модель процесса диссоциации газовых гидратов в предположении постоянного давления. Впервые разработаны вариационные формулировки на базе многомасштабного (Multiscale) метода конечных элементов и вариационной формулировки разрывного метода Галёркина для стационарных и нестационарных процессов; получены их дискретные аналоги; реализованы и исследованы вычислительные схемы. Эти вычислительные схемы использованы для численного моделирования процесса диссоциации газовых гидратов.

Личный вклад. Все представленные в работе научные результаты получены соискателем лично, если не указаны ссылки на работы других авторов.

Значимость работы. Разработаны новые вычислительные схемы многомасштабного метода Галёркина, их свойства исследованы на модельных задачах. Практическая ценность работы обусловлена возможностью использовать разработанный математический аппарат для исследования физических свойств гидратсодержащих пород, интерпретации результатов физических измерений и оптимизации схем физических экспериментов. Предложенные вычислительные схемы могут быть эффективно применены для исследования различных физических процессов с фазовым переходом.

Представление работы. Основные результаты работы докладывались на V международной школе молодых ученых и специалистов «Физика окружающей среды» (Томск, 2006), IX Всероссийской конференции молодых учёных по математическому моделирова-

нию и информационным технологиям (с участием иностранных учёных) (Кемерово, 2008 г), Российской научно-технической конференции «Информатика и проблемы телекоммуникаций» (Новосибирск, 2007), Российской научно-технической конференции «Информатика и проблемы телекоммуникаций» (Новосибирск, 2008), Молодёжной международной научной школе-конференции «Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач» (Новосибирск, 2009).

Публикации. По теме диссертационной работы опубликовано 6 печатных работ, в том числе: одна статья в издании, рекомендованно ВАК для представления результатов докторских диссертаций (12 печ. л.), 2 – в рецензируемых журналах (11 печ. л.), 2 – в трудах российских конференций (6 печ. л.), 1 – в тезисах международных конференций (1 печ. л.). Все статьи написаны без соавторов.

Структура работы. Работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы (103 наименования). Работа изложена на 108 страницах, включая 32 рисунка, 3 таблицы.

Автор выражает глубокую благодарность научному руководителю профессору кафедры вычислительных технологий Новосибирского государственного технического университета д.т.н. Э. П. Шуриной, доценту кафедры вычислительных технологий Новосибирского государственного технического университета к.т.н. Н. Б. Иткиной, а также А. М. Прохвятилову.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение. Во введении приведены объект и предмет исследования, сформулированы актуальность работы, цель и задачи исследования, методы исследования, представлены основные результаты исследования и научная новизна работы. Кратко изложены структура и основное содержание диссертации.

Глава 1. Задачи с движущейся границей часто встречаются в природе и технике и представляют определённые сложности при их численном решении. В первой главе рассмотрен этот класс задач и класс неконформных методов конечных элементов, которые можно применять для их решения. Особое внимание уделяется многомасштабным (Multiscale) методам и разрывному методу Галёркина. В некоторых случаях граница есть неизвестная функция времени, ко-

тору приходится определять исходя из решения дифференциального уравнения. Тогда нам необходимо два краевых условия: одно, чтобы определять положение движущейся границы и другое – на неподвижной части границы. Этот класс задач называется задачами Стефана. Основная сложность этих задач состоит в том, что часть границы области со временем меняется, а это требует специальных методов решения. Традиционный подход состоит в построении адаптивных сеток, что означает триангуляцию области на каждом шаге по времени.

В п. 1.2 предложен обзор математических моделей для задачи Стефана, в частности самая общая модель процессов формирования и диссоциации газовых гидратов.

В п. 1.3 перечисляются существующие неконформные методы конечных элементов. Противопотоковые смешанные методы аппроксимируют конвективные и диффузионные члены разными способами, например MUSCL-схемами и стандартным методом конечных элементов.

Методы декомпозиции области можно рассматривать как декомпозицию конечноэлементного пространства на сумму подпространств. Подзадачи решаются прямыми или итерационными методами, затем в ходе итерационного процесса происходит обмен информацией между подобластями. В методе мортаров используется мортарова проекция для согласования решений, найденных в каждой из подобластей. Метод ориентирован на решение задач на подобластях с контрастными свойствами среды. В методе Химера используется формула численного интегрирования для согласования решений, найденных в каждой из подобластей.

Основной особенностью разрывного метода Галёркина является то, что решение определяется в пространствах разрывных кусочно-полиномиальных функций, то есть не требуется непрерывность решения на границах конечных элементов. Это делает метод очень удобным для *hp*-адаптации и работы с неструктурированными сетками. А благодаря использованию численных потоков (фактически особых операторов следа) можно повысить устойчивость метода. Дан обзор семейства многомасштабных методов конечных элементов и методов решения СЛАУ (Hughes и др., 1995-2007). Ряд авторов рассматривает сочетание непрерывного и разрывного методов – в разных подобластях вычислительной области используется тот или иной метод.

Огромный интерес представляют многомасштабные методы, использующие разрывный метод Галёркина в качестве численного метода решения задачи в «мелком» масштабе. В статьях ICES (Institute of Computational Engineering and Sciences, University of Texas, Austin, 2005-2006) предложен многомасштабный разрывный метод Галёркина, имеющий вычислительную структуру непрерывного метода конечных элементов. В результате получился разрывный метод Галёркина, вычислительно значительно более эффективный. Вводятся непрерывное (грубое) и разрывное (мелкое) пространства и строится оператор перехода. Многомасштабные вариационные методы позволяют естественным образом использовать идеологию многосеточных (многоуровневых) методов для решения СЛАУ. Итерации начинаются на разрывном пространстве, после нескольких шагов невязка проектируется на непрерывное пространство, затем погрешность вновь уточняется на разрывном пространстве (коррекция). Впервые многосеточный метод был предложен в 1964 г. Р. П. Федоренко.

В п. 1.4 изложены основные понятия и методы, относящиеся к решению обратных коэффициентных задач.

Построение эффективных, устойчивых методов для решения прямых и обратных задач с движущейся границей является актуальной задачей вычислительной математики. Многомасштабные методы представляют собой одну из возможных альтернатив традиционных методов, использующих при решении таких задач адаптивные сетки.

Глава 2. Во второй главе приведена математическая модель процесса диссоциации газовых гидратов, введены функциональные пространства и построены вариационные формулировки многомасштабного метода Галёркина, эквивалентные исходной задаче.

В начальный момент времени всё вещество находится в твёрдой фазе (гидрат, минеральный скелет). Под действием нагревателя температура среды повышается, и когда она достигает значения T_m (температура фазового перехода), гидрат разлагается, образуя метан и воду. С этого момента область разделяется на две подобласти, в одной из которых вещество находится в жидкой фазе, в другой – в твёрдой.

Теплообмен в твёрдой фазе:

$$c_S \rho_S \frac{\partial T_S}{\partial t} = \operatorname{div} (\lambda_S \operatorname{grad} T_S) + F(I), \quad (1)$$

где c , ρ , λ – теплоёмкость, плотность, теплопроводности породы в твёрдой фазе, T – температура, I – сила тока.

Теплообмен в жидкой фазе (после диссоциации):

$$c_L \rho_L \frac{\partial T_L}{\partial t} = \operatorname{div} (\lambda_L \operatorname{grad} T_L). \quad (2)$$

Условие Стефана на границе раздела фаз:

$$\lambda_S \frac{\partial T_S}{\partial n} \Big|_{\xi(t)} - \lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial n} \Big|_{\xi(t)} = L \rho_r \Phi \frac{\partial \xi(t)}{\partial t}, \quad (3)$$

где Φ – пористость, $\xi(t)$ – местоположение фронта реакции в момент времени t , n – нормаль к поверхности фронта реакции, L – скрытая теплота фазового перехода. Условие фазового перехода:

$$T_S \Big|_{\xi(t)} = T_L \Big|_{\xi(t)} = T_m, \quad (4)$$

где T_m – температура фазового перехода. Краевые условия:

$$T \Big|_{\Gamma_D} = g_D, \quad (5)$$

$$T \Big|_{\Gamma_N} = 0. \quad (6)$$

Начальное условие:

$$T \Big|_{t=0} = T_0. \quad (7)$$

В п. 2.2 введены конечноэлементная сетка τ_h и функциональные пространства: непрерывное пространство $H^1(\Omega)$, разрывное пространство $H^1(\tau_h)$, векторное конечномерное пространство $\Sigma_h \subset H^1(\tau_h)$. Рассмотрим декомпозицию функционального пространства $V = H^1(\tau_h)$ на «грубое» V_c и «мелкое» V_d (соответственно непрерывное и разрывное). Пусть разрывная компонента решения $T_d \in V_d$ определена не на всей области Ω , а на некоторой подобласти Ω_d . Непрерывная компонента решения $T_c \in V_c$ определена на Ω . На границе подобласти Ω_d задано условие $T_d \Big|_{\Omega_d} = 0$. В п. 2.3 построена вариационная формулировка разрывного метода Галёркина и на её основе – вариационная формулировка многомасштабного метода Галёркина. Пусть $\nabla T = \sigma$, $\Gamma = \bigcup_{K \in \tau_h} \partial K$, $Tr(\Gamma) = \prod_{K \in \tau_h} L^2(\partial K)$. Тогда $\hat{T}_K = (\hat{T}_K)_{K \in \tau_h} \in Tr(\Gamma)$, $\hat{\sigma}_K = (\hat{\sigma}_K)_{K \in \tau_h} \in (Tr(\Gamma))^2$.

$\Gamma_{int} = \Gamma \setminus \partial\Omega$, $\{\cdot\} : Tr(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma_{int})$, и оператор среднего $\{\cdot\} : [Tr(\Gamma)]^3 \rightarrow [L^2(\Gamma)]^3$ вводится следующим образом:

на внутренней грани e_{int}

$$\{v\} = \frac{1}{2}(v_K + v_N),$$

$$\{q\} = \frac{1}{2}(q_K + q_N),$$

на внешней грани e_{bnd}

$$\{v\} = v_K,$$

$$\{q\} = q_K,$$

а оператор скачка $[\cdot] : Tr(\Gamma) \rightarrow [L^2(\Gamma)]^3$, $[\cdot] : [Tr(\Gamma)]^3 \rightarrow L^2(\Gamma_{int})$ следующим образом:

на внутренней грани e_{int}

$$[v] = v_K n_K + v_N n_N,$$

$$[q] = q_K \cdot n_K + q_N \cdot n_N,$$

на внешней грани e_{bnd}

$$[v] = v_K n_K,$$

$$[q] = q_K \cdot n_K.$$

Введём лифтинг-оператор $r : (L^2(\Gamma))^3 \rightarrow \Sigma_h$ соотношением

$$\int_{\Omega} r(q) \cdot \tau \, dx = - \int_{\Gamma} q \cdot \{\tau\} \, ds, \quad \tau \in \Sigma_h$$

и численные потоки $\hat{T} = \{T\}$, $\hat{\sigma} = \{\nabla T\} + \eta_\epsilon r(\{T\})$, $\eta_\epsilon > 0$ (Басси и др., 1964).

Билинейная форма разрывного метода Галёркина (Д. Арнольд и др., 2000):

$$\begin{aligned} a(T, v) = & \int_{\Omega} c\rho \frac{\partial T}{\partial t} v \, dx + \int_{\Omega} \lambda \nabla T \cdot \nabla v \, dx - \int_{\Gamma_{int} \cup \Gamma_D} \lambda(\{T\}) \cdot \{\nabla v\} + \\ & \{\nabla T\} \cdot [v] \, ds - \sum_{e \in \Gamma_{int}} \eta_e \int_e \lambda \{r_e(\{T\})\} \cdot [v] \, ds - \\ & \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,gD}(\{T\}) \cdot v n \, ds + \\ & \int_{\Gamma_D} \lambda g_D n \cdot \nabla v \, ds. \quad (8) \end{aligned}$$

Вариационная формулировка с учётом конкретного вида численных потоков (Bassi и др., 1964):

наййти $T_c \in V_c$ и $T_d \in V_d$ такие, что

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} c\rho \frac{\partial T_c}{\partial t} v_c dx + \int_{\Omega} \lambda \nabla T_c \cdot \nabla v_c dx + \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,g_D}(T_c) \cdot v_c n ds + \\ & \int_{\Gamma_D} \lambda g_D n \cdot \nabla v_c ds + \int_{\Omega} \lambda \nabla T_d \cdot \nabla v_c dx + \int_{\Gamma_{int} \cup \Gamma_D} \lambda [T_d] \cdot \{\nabla v_c\} ds + \\ & \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,g_D}(T_d) \cdot v_c n ds + \int_{\Gamma_D} \lambda g_D n \cdot \nabla v_c ds = \\ & \int_{\Omega} f v_c dx \quad \forall v_c \in V_c, \quad (9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} c\rho \frac{\partial T_d}{\partial t} v_d dx + \int_{\Omega} \lambda \nabla T_c \cdot \nabla v_d dx + \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,0}([T_c]) \cdot v_d n ds + \\ & \int_{\Gamma_D} \lambda 0 n \cdot \nabla v_d ds + \int_{\Omega} \lambda \nabla T_d \cdot \nabla v_d dx - \\ & \int_{\Gamma_{int} \cup \Gamma_D} \lambda ([T_d] \cdot \{\nabla v_d\} + \{\nabla T_d\} \cdot [v_d]) ds - \\ & \sum_{e \in \Gamma_{int}} \eta_e \int_e \lambda \{r_e([T_d])\} \cdot [v_d] ds - \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,0}([T_d]) \cdot v_d n ds = 0 \quad \forall v_d \in V_d. \quad (10) \end{aligned}$$

Краевые условия (5), (6) и условие Стефана (3) естественным образом входят в вариационную формулировку, условие фазового перехода (4) в вариационную формулировку не вошло и будет использоваться для определения местоположения фронта реакции, а начальное условие (7) выполняется в сильной форме.

Глава 3. Третья глава посвящена построению дискретных аналогов вариационных формулировок, разработанных в гл. 2.

В п. 3.1 строится дискретный аналог вариационной формулировки, построенной во второй главе.

Дискретный аналог вариационной формулировки (9), (10):

найти $u_{ch} \in V_{ch}$ и $u_{dh} \in V_{dh}$ такие, что

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} c\rho \frac{\partial T_{ch}}{\partial t} v_{ch} dx + \int_{\Omega} \lambda \nabla T_{ch} \cdot \nabla v_c dx + \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,g_D}(T_{ch}) \cdot v_c n ds + \\
& \int_{\Gamma_D} \lambda g_D n \cdot \nabla v_c ds + \int_{\Omega} \lambda \nabla T_{dh} \cdot \nabla v_c dx + \int_{\Gamma_{int} \cup \Gamma_D} \lambda [T_{dh}] \cdot \{\nabla v_c\} ds + \\
& \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,g_D}(T_{dh}) \cdot v_c n ds + \int_{\Gamma_D} \lambda g_D n \cdot \nabla v_c ds = \\
& \int_{\Omega} f v_c dx \quad \forall v_c \in V_{ch}, \quad (11)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} c\rho \frac{\partial T_{dh}}{\partial t} v_{dh} dx + \int_{\Omega} \lambda \nabla T_{ch} \cdot \nabla v_d dx + \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,0}([T_{ch}]) \cdot v_d n ds + \\
& \int_{\Gamma_D} \lambda 0 n \cdot \nabla v_d ds + \int_{\Omega} \lambda \nabla T_{dh} \cdot \nabla v_d dx - \\
& \int_{\Gamma_{int} \cup \Gamma_D} \lambda ([T_{dh}] \cdot \{\nabla v_d\} + \{\nabla T_{dh}\} \cdot [v_d]) ds - \\
& \sum_{e \in \Gamma_{int}} \eta_e \int_e \lambda \{r_e([T_{dh}])\} \cdot [v_d] ds - \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,0}([T_{dh}]) \cdot v_d n ds = 0 \quad \forall v_d \in V_{dh}. \quad (12)
\end{aligned}$$

Рассмотрена дискретизация отдельных слагаемых вариационной формулировки, лифтинг-операторов, построены локальные СЛАУ для конечных элементов «мелкой» и «грубой» сеток, алгоритм сборки глобальной СЛАУ.

В результате дискретизации получается система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) следующей блочной структуры:

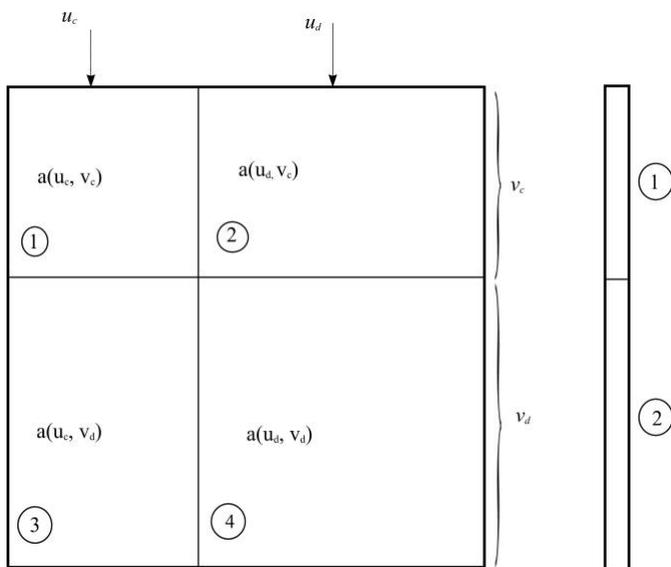


Рис. 1. Блочная структура СЛАУ

В п. 3.3 сформулирован двухуровневый алгоритм решения СЛАУ на основе идеологии многосеточных методов. Пусть m – размерность пространства V_{ch} , а n – размерность пространства V_h .

Требуется решить СЛАУ $Ax = b$, где A – матрица размерности $n \times n$, b – вектор размерности n . Пусть $P_{n \times m}$ – матрица оператора проектирования из V_h на V_{ch} . Алгоритм решения СЛАУ:

- выбираем начальное приближение x_0 ;
- $r_0 = b - Ax_0$ – начальная невязка; для $i = 1, 2, \dots$:

$$\begin{aligned}
 -g &= P^T r_{i-1} \\
 y &= (P^T A P)^{-1} g \\
 x_{i-\frac{1}{2}} &= x_i + P y \\
 r_{i-\frac{1}{2}} &= b - A x_{i-\frac{1}{2}} \\
 z &= A^{-1} r_{i-\frac{1}{2}} \\
 x_i &= x_{i-\frac{1}{2}} + z \\
 r_i &= b - A x_i \\
 \text{если } \|r_i\| &< \nu \|b\| \text{ – стоп.}
 \end{aligned}$$

$\nu > 0$ – вещественное число. Ключевой момент этого алгоритма – построение оператора проектирования из пространства V_h на его подпространство V_{ch} . В работе предлагается осреднять в каждом узле веса в разложении функции T_d по базисным функциям V_d .

В п. 3.4 рассмотрены результаты решения модельных задач с целью верификации полученной вычислительной схемы. Рассмотрены модельные задачи с гладким решением (оценен порядок аппроксимации), с решением с высокими градиентами, с разрывным коэффициентом теплопроводности. Подтверждается вывод о порядке аппроксимации метода, показано преимущество использования многомасштабного решения перед конформным и неконформным МКЭ и специального решателя СЛАУ перед методом BiCGStab; также показана необходимость конфигурации сеток τ_c и τ_d с учётом особенностей задачи.

В п. 3.5 рассмотрен алгоритм решения задачи, основанный на учёте движения фронта реакции, и его технологические особенности (определение ширины подобласти с разрывным решением, идентификация фронта реакции, интерполяция решения с предыдущего временного слоя на сетку, полученную на текущем временном слое). Выпишем предложенный алгоритм.

- Задать начальное условие $T|_{t=0} = T_0$, подобласть P_0 в окрестности источника, τ_d – триангуляцию P_0 ;
- Для каждого $i = 1 \dots N$:
 - на i -м шаге по времени с учётом разбиения области P_{i-1} определяем решение $T(t_i)$;
 - анализируя решение $T(t_i)$, определяем новое положение фронта $\xi(t_i)$;
 - в соответствии с положением $\xi(t_i)$ определяем P_i ; триангулируем P_i (строим $\tau_d(P_i)$);
 - интерполируем полученное решение T_i на P_i .

Глава 4 посвящена решению прямой и обратной задачи Стефана для моделирования процесса диссоциации газовых гидратов. В п. 4.1 рассмотрена предметная область, а именно – газогидраты углеводородных газов, в частности метана; область их распространения, свойства, методы обнаружения.

Результатом моделирования являются термограммы (графики изменения температуры породы после включения нагревателя); в п. 4.2 построены термограммы для различных составов породы (песок, лёд, гидрат в нескольких комбинациях), приведены сравнения термограмм, графики движения фронта реакции. Результаты математического моделирования на базе разработанных схем соответствуют поведению физического процесса.

В ходе измерения температуры давление меняется слабо, поэтому для моделирования процесса нагревания образца и дальнейшей диссоциации газовых гидратов будем использовать модель (1)–(7). Давление в явном виде не входит в модель, однако оно влияет на температуру фазового перехода. Границей Γ_D будем считать стенки камеры, Γ_N – верхнее и нижнее основания камеры.

Значения параметров λ_S , λ_L , $c_{pS}\rho_S$, $c_{pL}\rho_L$ не всегда известны из экспериментов. Но, зная плотность, теплопроводность, теплоёмкость чистых веществ, можно попытаться определить параметры смеси, используя некоторую процедуру осреднения. Один из возможных вариантов осреднения предложен в работе Гольмштока и др. (Гольмшток и др., 2005):

$$c_S\rho_S = c_{\text{п}}\rho_{\text{п}}(1 - \Phi) + c_{\text{в}}\rho_{\text{в}}(1 - \delta)\Phi + \rho_{\text{г}}c_{\text{г}}\Phi\delta,$$

$$\lambda_S = \lambda_{\text{п}}(1 - \Phi) + \lambda_{\text{в}}(1 - \delta) + \lambda_{\text{г}}\Phi\delta,$$

$$\lambda_L = (1 - \Phi)\lambda_{\text{п}} + (1 - (1 - \mu)\delta)\Phi\lambda_{\text{в}} + (1 - \mu)\Phi\delta\lambda_{\text{г}},$$

$$c_L\rho_L = \rho_{\text{п}}c_{\text{п}}(1 - \Phi) + (1 - (1 - \mu)\delta)\Phi\rho_{\text{в}}c_{\text{в}} + \rho_{\text{г}}c_{\text{г}}(1 - \mu)\Phi\delta,$$

где $c_{\text{п}}$, $c_{\text{в}}$, $c_{\text{г}}$, $\rho_{\text{п}}$, $\rho_{\text{в}}$, $\rho_{\text{г}}$ – теплоёмкость и плотность песка, воды и газогидрата соответственно, Φ – пористость, δ – содержание гидрата в порах, μ – относительный объём воды, освобождающийся при диссоциации единичного объёма гидрата.

Приведём пример движения границы раздела фаз при моделировании процесса таяния льда при нормальном давлении (рис. 2).

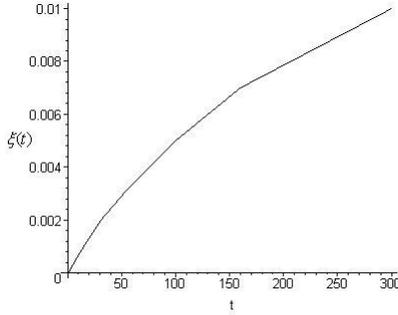


Рис. 2. Движение границы раздела фаз

Приведём пример термограмм для следующего состава смеси: пористость – 0.4, содержание гидрата в порах – 0.6. Линейная мощность нагревателя 6.7 Вт/м. Значение коэффициента теплопроводности меняется в зависимости от давления.

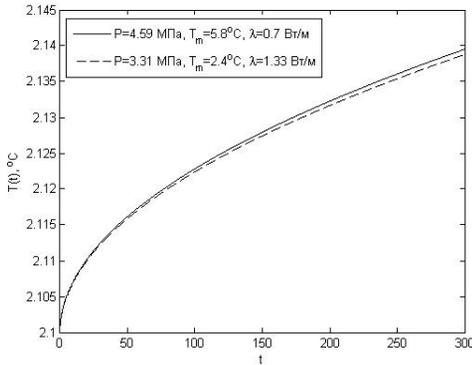


Рис. 3. Вычислительный эксперимент

Для методов обнаружения газовых гидратов существенна возможность решения обратной задачи – задачи идентификации коэффициента теплопроводности. В п. 4.3 рассмотрено решение обратной задачи Стефана в одномерном пространстве. Такая постановка закономерна при условии однородности породы, что достижимо в лабораторных условиях. Модель наблюдения имеет вид: $b = F[\lambda] + \varepsilon$, где ε

– шум наблюдений. Устойчивое решение обратной коэффициентной задачи можно получить путём минимизации функционала ошибки

$$J(\lambda) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_n} \int_{\Omega} (T(x, t) - T^*(x, t))^2 dx dt,$$

где $T^*(x, t)$ – экспериментальные данные.

Таблица 1. Зависимость погрешности от уровня шума

Уровень зашумления	$ \lambda_S \text{ истинное} - \lambda_{Sh} $
0	$1.22 \cdot 10^{-3}$
0.01	$8.81 \cdot 10^{-3}$
0.1	$3.65 \cdot 10^{-2}$

При измерении температуры с точностью до $0.01^\circ C$ коэффициент теплопроводности будет определяться с точностью до десятых. Если же погрешность прибора не больше $0.005^\circ C$, как указано в работе Дучкова и др. (Дучков и др., 2009), мы получим два верных знака после запятой.

В пятой главе приведено описание разработанного программного комплекса.

Основные результаты исследования сформулированы в заключении диссертации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты работы:

- предложена упрощённая математическая модель процесса диссоциации газовых гидратов;
- введены необходимые конечноэлементные пространства, выписаны вариационные формулировки многомасштабного метода Галёркина; разработаны, реализованы и верифицированы вычислительные схемы многомасштабного метода конечных элементов на базе разрывного метода Галёркина; предложен алгоритм решения задачи Стефана в трёхмерной постановке, в том числе различные технологические процедуры: учёт движения фронта реакции, его идентификация, построение соответствующих конечноэлементных сеток, интерполяция решения на новую сетку); разработано программно-алгоритмическое обеспечение для решения обратной задачи Стефана в одномерном

пространстве с использованием алгоритма Флетчера-Ривса для минимизации функционала ошибки; для решения данного класса задач создан программный комплекс на языке C++, проведена его верификация на модельных задачах;

- полученные схемы применены для моделирования процесса диссоциации газовых гидратов в предположении постоянного давления; численные решения обнаруживают вполне физичное поведение;

Предложенные в диссертационной работе подходы могут быть применены для решения широкого класса реальных задач с движущейся границей.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикация в издании, рекомендованном ВАК

- Сукманова Е. Н. Разрывный метод Галёркина для решения невязкой задачи Бюргерса // Научный вестник НГТУ, №3(32), 2008, стр. 45-56;

Публикации в рецензируемых журналах

- Сукманова Е. Н. Разрывный метод Галёркина для решения задач диффузии - конвекции. Вариационная постановка // Сборник научных трудов НГТУ. - 2006. - № 3, с. 49-54;
- Сукманова Е. Н. Решение конвективно-диффузионных задач разрывным методом Галёркина // Сборник научных трудов НГТУ. - 2006. - № 3, с. 55-60;

Публикации в трудах конференций

- Сукманова Е. Н. Решение эллиптической краевой задачи разрывным методом Галёркина с использованием иерархического базиса // Российская научно-техническая конференция «Информатика и проблемы телекоммуникаций», 24-25 апреля 2008, Новосибирск. Материалы конференции, т. 1, стр. 77-81;
- Сукманова Е. Н. Многомасштабный метод конечных элементов с использованием вариационной постановки разрывного метода Галёркина // Российская научно-техническая конференция «Информатика и проблемы телекоммуникаций», 27-28 апреля 2009, Новосибирск. Материалы конференции, т. 1, стр. 64-67;

Публикации в тезисах конференций

- Сукманова Е. Н. Решение обратной коэффициентной задачи для процессов с фазовым переходом // Молодежная международная научная школа-конференция «Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач». Тезисы докладов. 10-20 августа 2009 г., г. Новосибирск. Стр. 97.